



Full wwPDB EM Validation Report ⓘ

Mar 6, 2026 – 06:37 PM UTC

PDB ID : 7V1N / pdb_00007v1n
EMDB ID : EMD-31628
Title : Structure of the Clade 2 C. difficile TcdB in complex with its receptor TFPI
Authors : Luo, J.; Yang, Q.; Zhang, X.; Zhang, Y.; Wan, L.; Li, Y.; Tao, L.
Deposited on : 2021-08-05
Resolution : 3.20 Å(reported)

This is a Full wwPDB EM Validation Report for a publicly released PDB entry.

We welcome your comments at validation@mail.wwpdb.org

A user guide is available at

<https://www.wwpdb.org/validation/2017/EMValidationReportHelp>

with specific help available everywhere you see the ⓘ symbol.

The types of validation reports are described at

<http://www.wwpdb.org/validation/2017/FAQs#types>.

The following versions of software and data (see [references ⓘ](#)) were used in the production of this report:

EMDB validation analysis : 0.0.1.dev132
MolProbity : 4-5-2 with Phenix2.0
Percentile statistics : 20250101.v01 (using entries in the PDB archive January 1st 2025)
EM percentile statistics : 202505.v01 (Using data in the EMDB archive up until May 2025)
MapQ : 1.9.13
Ideal geometry (proteins) : Engh & Huber (2001)
Ideal geometry (DNA, RNA) : Parkinson et al. (1996)
Validation Pipeline (wwPDB-VP) : 2.49

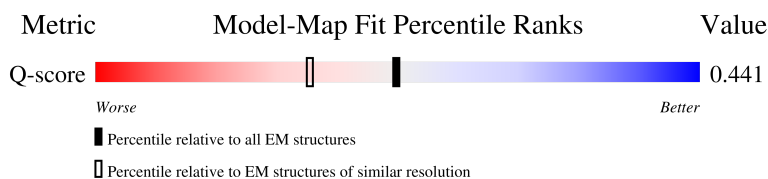
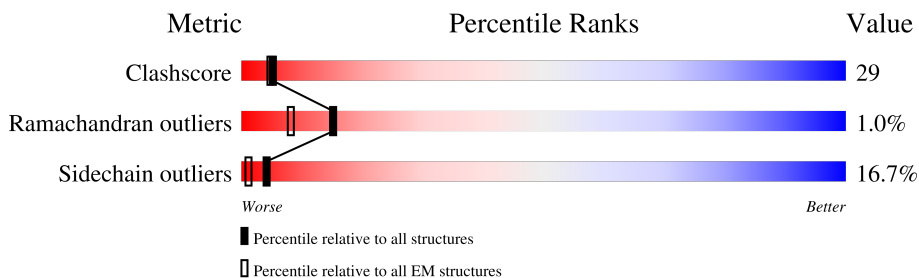
1 Overall quality at a glance

The following experimental techniques were used to determine the structure:

ELECTRON MICROSCOPY

The reported resolution of this entry is 3.20 Å.

Percentile scores (ranging between 0-100) for global validation metrics of the entry are shown in the following graphic. The table shows the number of entries on which the scores are based.



Metric	Whole archive (#Entries)	EM structures (#Entries)	Similar EM resolution (#Entries, resolution range(Å))
Clashscore	229148	23984	-
Ramachandran outliers	224038	23583	-
Sidechain outliers	223484	23102	-
Q-score	-	25397	15020 (2.70 - 3.70)

The table below summarises the geometric issues observed across the polymeric chains and their fit to the map. The red, orange, yellow and green segments of the bar indicate the fraction of residues that contain outliers for ≥ 3 , 2, 1 and 0 types of geometric quality criteria respectively. A grey segment represents the fraction of residues that are not modelled. The numeric value for each fraction is indicated below the corresponding segment, with a dot representing fractions $\leq 5\%$. The upper red bar (where present) indicates the fraction of residues that have poor fit to the EM map (all-atom inclusion $< 40\%$). The numeric value is given above the bar.

Mol	Chain	Length	Quality of chain
1	A	2375	
2	K	251	

2 Entry composition

There are 2 unique types of molecules in this entry. The entry contains 19156 atoms, of which 0 are hydrogens and 0 are deuteriums.

In the tables below, the AltConf column contains the number of residues with at least one atom in alternate conformation and the Trace column contains the number of residues modelled with at most 2 atoms.

- Molecule 1 is a protein called Toxin B.

Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
1	A	2344	Total	C	N	O	S	0	0
			18665	11903	2935	3784	43		

There are 19 discrepancies between the modelled and reference sequences:

Chain	Residue	Modelled	Actual	Comment	Reference
A	366	ASP	GLY	conflict	UNP Q9EXR0
A	385	ASN	ASP	conflict	UNP Q9EXR0
A	680	ILE	LEU	conflict	UNP Q9EXR0
A	1211	LYS	GLU	conflict	UNP Q9EXR0
A	1528	LEU	ILE	conflict	UNP Q9EXR0
A	1618	SER	PHE	conflict	UNP Q9EXR0
A	1693	ILE	VAL	conflict	UNP Q9EXR0
A	1697	ASN	GLY	conflict	UNP Q9EXR0
A	1874	ALA	PRO	conflict	UNP Q9EXR0
A	2016	LYS	ARG	conflict	UNP Q9EXR0
A	2229	THR	ALA	conflict	UNP Q9EXR0
A	2368	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2369	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2370	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2371	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2372	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2373	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2374	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0
A	2375	HIS	-	expression tag	UNP Q9EXR0

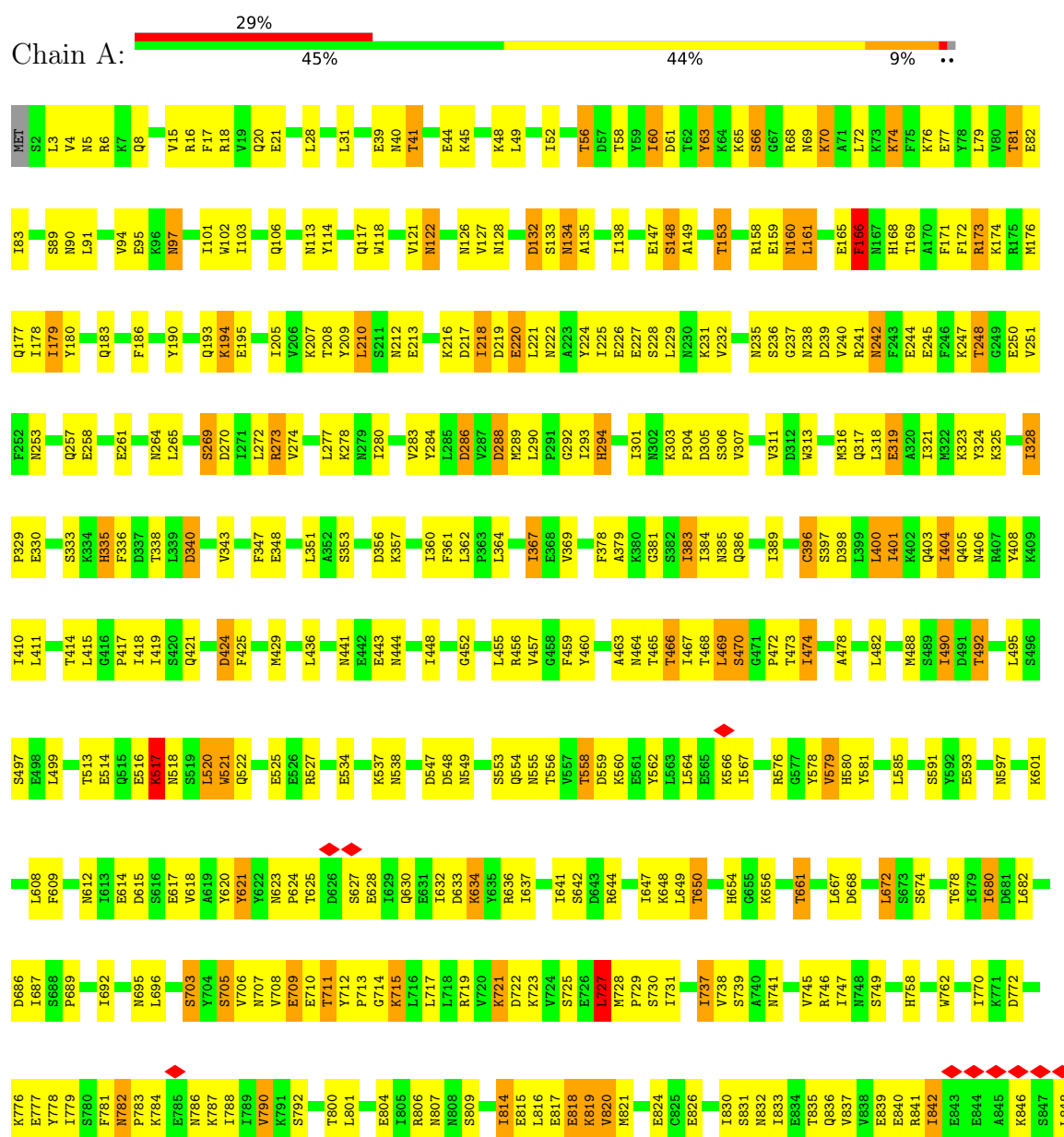
- Molecule 2 is a protein called Isoform Beta of Tissue factor pathway inhibitor.

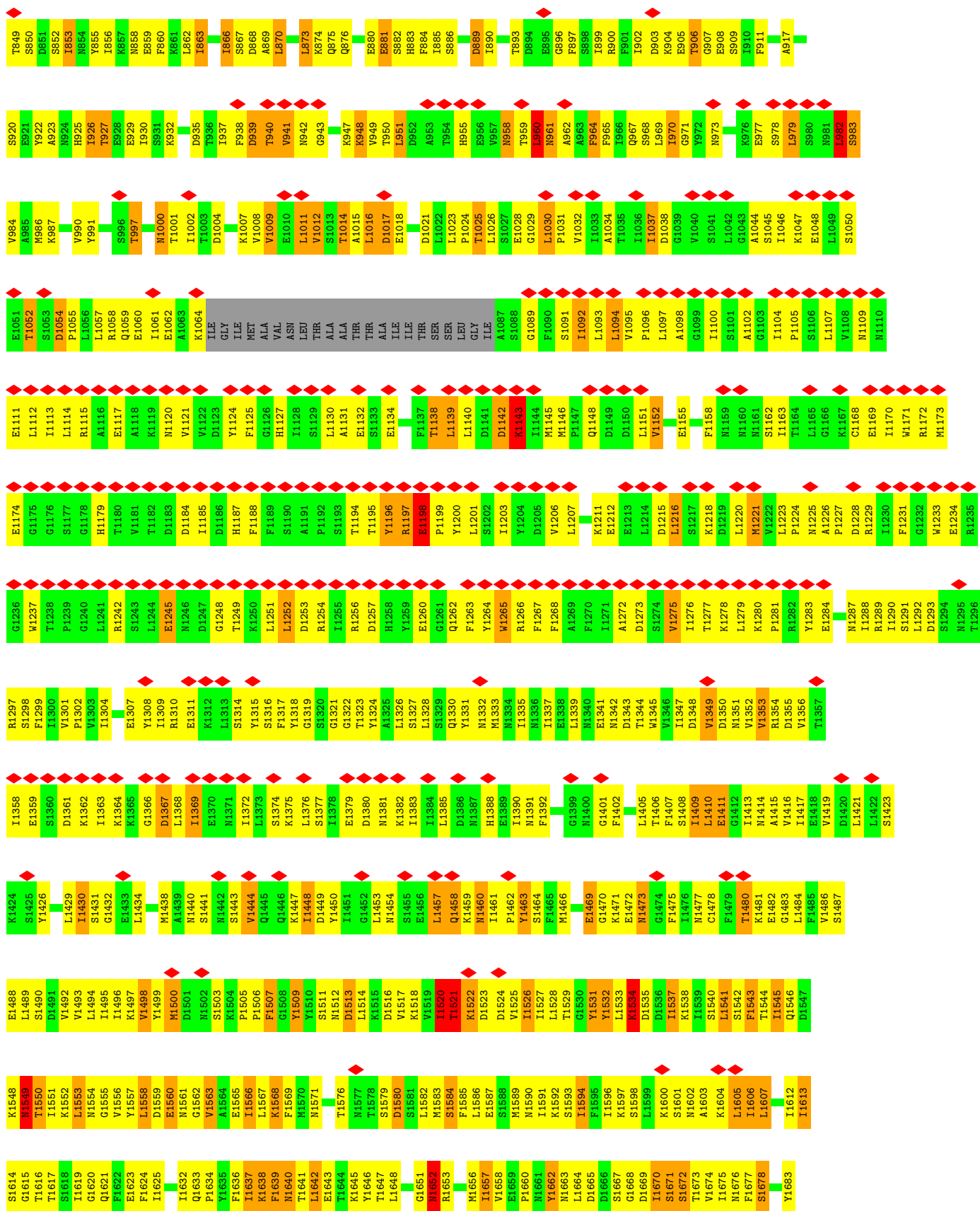
Mol	Chain	Residues	Atoms					AltConf	Trace
2	K	59	Total	C	N	O	S	1	0
			491	306	81	97	7		

3 Residue-property plots

These plots are drawn for all protein, RNA, DNA and oligosaccharide chains in the entry. The first graphic for a chain summarises the proportions of the various outlier classes displayed in the second graphic. The second graphic shows the sequence view annotated by issues in geometry and atom inclusion in map density. Residues are color-coded according to the number of geometric quality criteria for which they contain at least one outlier: green = 0, yellow = 1, orange = 2 and red = 3 or more. A red diamond above a residue indicates a poor fit to the EM map for this residue (all-atom inclusion < 40%). Stretches of 2 or more consecutive residues without any outlier are shown as a green connector. Residues present in the sample, but not in the model, are shown in grey.

• Molecule 1: Toxin B







4 Experimental information

Property	Value	Source
EM reconstruction method	SINGLE PARTICLE	Depositor
Imposed symmetry	POINT, Not provided	
Number of particles used	227825	Depositor
Resolution determination method	FSC 0.143 CUT-OFF	Depositor
CTF correction method	NONE	Depositor
Microscope	FEI TITAN KRIOS	Depositor
Voltage (kV)	300	Depositor
Electron dose ($e^-/\text{\AA}^2$)	50	Depositor
Minimum defocus (nm)	Not provided	
Maximum defocus (nm)	Not provided	
Magnification	Not provided	
Image detector	GATAN K3 (6k x 4k)	Depositor
Maximum map value	0.190	Depositor
Minimum map value	-0.108	Depositor
Average map value	0.000	Depositor
Map value standard deviation	0.004	Depositor
Recommended contour level	0.02	Depositor
Map size ($\text{\AA}$)	347.84, 347.84, 347.84	wwPDB
Map dimensions	320, 320, 320	wwPDB
Map angles ($^\circ$)	90.0, 90.0, 90.0	wwPDB
Pixel spacing ($\text{\AA}$)	1.087, 1.087, 1.087	Depositor

5 Model quality

5.1 Standard geometry

The Z score for a bond length (or angle) is the number of standard deviations the observed value is removed from the expected value. A bond length (or angle) with $|Z| > 5$ is considered an outlier worth inspection. RMSZ is the root-mean-square of all Z scores of the bond lengths (or angles).

Mol	Chain	Bond lengths		Bond angles	
		RMSZ	$\# Z > 5$	RMSZ	$\# Z > 5$
1	A	0.61	4/19027 (0.0%)	0.76	17/25754 (0.1%)
2	K	0.38	0/504	0.72	0/674
All	All	0.61	4/19531 (0.0%)	0.76	17/26428 (0.1%)

All (4) bond length outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(Å)	Ideal(Å)
1	A	581	TYR	C-N	-9.67	1.23	1.33
1	A	859	GLU	CA-C	-7.65	1.42	1.52
1	A	1198	GLU	C-N	7.07	1.50	1.33
1	A	91	LEU	C-N	-5.96	1.24	1.33

All (17) bond angle outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type	Atoms	Z	Observed(°)	Ideal(°)
1	A	1198	GLU	CA-C-N	14.49	137.95	119.84
1	A	1198	GLU	C-N-CA	14.49	137.95	119.84
1	A	960	LEU	N-CA-C	-7.17	104.56	113.38
1	A	245	GLU	N-CA-C	-6.53	103.58	113.89
1	A	1058	ARG	CA-C-N	-5.84	114.55	121.90
1	A	1058	ARG	C-N-CA	-5.84	114.55	121.90
1	A	173	ARG	N-CA-C	-5.80	108.00	114.62
1	A	517	LYS	N-CA-C	-5.71	108.11	114.62
1	A	166	PHE	CB-CA-C	5.56	119.72	111.88
1	A	727	LEU	N-CA-C	-5.38	107.97	114.75
1	A	218	ILE	N-CA-C	-5.34	107.16	111.91
1	A	1775	ASN	N-CA-C	-5.22	105.58	112.94
1	A	1454	ASN	CA-C-N	5.17	131.42	121.54
1	A	1454	ASN	C-N-CA	5.17	131.42	121.54
1	A	943	GLY	O-C-N	5.17	124.74	121.85
1	A	1561	ASN	N-CA-C	-5.12	107.69	114.04
1	A	982	LEU	N-CA-C	-5.02	107.31	112.93

There are no chirality outliers.

There are no planarity outliers.

5.2 Too-close contacts

In the following table, the Non-H and H(model) columns list the number of non-hydrogen atoms and hydrogen atoms in the chain respectively. The H(added) column lists the number of hydrogen atoms added and optimized by MolProbity. The Clashes column lists the number of clashes within the asymmetric unit, whereas Symm-Clashes lists symmetry-related clashes.

Mol	Chain	Non-H	H(model)	H(added)	Clashes	Symm-Clashes
1	A	18665	0	17845	1056	0
2	K	491	0	443	19	0
All	All	19156	0	18288	1073	0

The all-atom clashscore is defined as the number of clashes found per 1000 atoms (including hydrogen atoms). The all-atom clashscore for this structure is 29.

All (1073) close contacts within the same asymmetric unit are listed below, sorted by their clash magnitude.

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1556:VAL:HA	1.55	1.36
1:A:1619:ILE:HG21	1:A:1641:THR:CG2	1.63	1.27
1:A:1541:LEU:CG	1:A:1556:VAL:HA	1.74	1.16
1:A:1031:PRO:HG2	1:A:1542:SER:HB2	1.14	1.13
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1556:VAL:HA	1.35	1.09
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1556:VAL:CA	2.33	1.07
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:NZ	1.70	1.05
1:A:1541:LEU:HG	1:A:1556:VAL:HA	1.37	1.05
1:A:1619:ILE:HG21	1:A:1641:THR:HG22	1.36	1.05
1:A:1541:LEU:HB3	1:A:1555:GLY:O	1.57	1.04
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1556:VAL:CA	1.87	1.03
1:A:1527:ILE:HG22	1:A:1542:SER:HB3	1.34	1.03
1:A:1031:PRO:HG2	1:A:1542:SER:CB	1.90	1.00
1:A:1619:ILE:HG21	1:A:1641:THR:HG23	1.41	0.98
1:A:1415:ALA:HA	1:A:1430:ILE:HA	1.46	0.97
1:A:1541:LEU:CB	1:A:1555:GLY:O	2.13	0.97
1:A:960:LEU:HD21	1:A:1651:GLY:HA2	1.45	0.95
1:A:708:VAL:O	1:A:711:THR:HG22	1.69	0.92
1:A:1376:LEU:HD13	1:A:1385:LEU:HB3	1.49	0.92
1:A:2098:ALA:O	1:A:2100:ILE:HG12	1.68	0.92
1:A:1061:ILE:CG1	1:A:1522:LYS:HE3	2.01	0.90

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:960:LEU:CD2	1:A:1651:GLY:HA2	2.00	0.90
1:A:1031:PRO:HB2	1:A:1527:ILE:HG21	1.52	0.90
1:A:1619:ILE:CG2	1:A:1641:THR:HG22	2.02	0.89
1:A:1197:ARG:HH21	1:A:1197:ARG:HG2	1.34	0.89
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1556:VAL:C	1.98	0.88
1:A:1527:ILE:CG2	1:A:1542:SER:HB3	2.05	0.86
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:CE	2.05	0.86
2:K:169:GLU:HA	2:K:172:LYS:HD3	1.58	0.85
1:A:1414:ASN:O	1:A:1431:SER:N	2.08	0.85
1:A:1619:ILE:CG2	1:A:1641:THR:CG2	2.53	0.85
1:A:278:LYS:NZ	1:A:398:ASP:OD1	2.09	0.85
1:A:2102:ILE:HD11	1:A:2110:TYR:O	1.75	0.85
1:A:902:ILE:HG22	1:A:903:ASP:H	1.41	0.84
1:A:1030:LEU:HD21	1:A:1612:ILE:HG12	1.60	0.84
1:A:1061:ILE:HG13	1:A:1522:LYS:HE3	1.59	0.83
1:A:1545:ILE:HG22	1:A:1551:ILE:HG13	1.60	0.83
1:A:2181:ASN:HD22	1:A:2187:VAL:HG11	1.44	0.83
1:A:1541:LEU:HD11	1:A:1557:TYR:N	1.93	0.83
1:A:1031:PRO:CG	1:A:1542:SER:HB2	2.05	0.82
1:A:881:GLU:HG2	1:A:905:GLU:HB3	1.60	0.82
1:A:1430:ILE:HG12	1:A:1463:TYR:CG	2.14	0.82
1:A:40:ASN:ND2	1:A:44:GLU:OE1	2.10	0.82
1:A:935:ASP:O	1:A:938:PHE:CE2	2.32	0.82
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1557:TYR:N	2.42	0.82
1:A:1171:TRP:CD2	1:A:1195:THR:HG22	2.15	0.81
1:A:547:ASP:OD2	1:A:654:HIS:ND1	2.13	0.81
1:A:1738:SER:O	1:A:1738:SER:OG	1.97	0.81
1:A:106:GLN:HA	1:A:228:SER:OG	1.81	0.80
1:A:1484:LEU:HD11	1:A:1545:ILE:HD11	1.63	0.80
1:A:2033:THR:HG22	1:A:2035:ASP:H	1.45	0.80
1:A:969:LEU:HD23	1:A:986:MET:HG3	1.62	0.80
1:A:1354:ARG:NH2	1:A:1409:ILE:O	2.13	0.80
1:A:1523:ASP:C	1:A:1525:VAL:H	1.88	0.80
1:A:2102:ILE:CD1	1:A:2110:TYR:O	2.29	0.80
1:A:628:GLU:OE2	1:A:630:GLN:NE2	2.16	0.80
1:A:324:TYR:HB2	1:A:351:LEU:HD13	1.64	0.79
1:A:2344:THR:HB	1:A:2358:PRO:HA	1.64	0.79
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:HZ3	1.44	0.79
1:A:218:ILE:O	1:A:222:ASN:ND2	2.16	0.79
1:A:1449:ASP:OD2	1:A:1481:LYS:NZ	2.16	0.79
1:A:1115:ARG:HD2	1:A:1120:ASN:HB3	1.65	0.78

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:786:ASN:OD1	1:A:787:LYS:N	2.15	0.78
1:A:1663:ASN:HA	1:A:1671:SER:HB2	1.66	0.78
1:A:2049:ASN:HB2	1:A:2053:GLU:HB3	1.66	0.78
1:A:1354:ARG:NH1	1:A:1366:GLY:O	2.17	0.77
1:A:1185:ILE:HG23	1:A:1266:ARG:HG2	1.67	0.77
1:A:2130:PHE:HA	1:A:2158:VAL:HG23	1.65	0.77
1:A:1094:LEU:O	1:A:1362:LYS:NZ	2.18	0.77
1:A:1520:ILE:CG1	1:A:1527:ILE:H	1.98	0.77
1:A:1988:LYS:HA	1:A:2000:PHE:HB2	1.65	0.77
1:A:1134:GLU:OE1	1:A:1148:GLN:NE2	2.18	0.77
1:A:1227:PRO:HG3	1:A:1309:ILE:HG12	1.67	0.77
1:A:1408:SER:HA	1:A:1414:ASN:HA	1.65	0.77
1:A:973:ASN:OD1	1:A:977:GLU:N	2.18	0.76
1:A:1170:ILE:HG22	1:A:1201:LEU:HB2	1.65	0.76
1:A:623:ASN:ND2	1:A:630:GLN:OE1	2.14	0.76
1:A:1171:TRP:CG	1:A:1195:THR:HG22	2.19	0.76
1:A:1473:ASN:HB3	1:A:1518:LYS:HA	1.67	0.76
1:A:1104:ILE:HG13	1:A:1105:PRO:HD2	1.69	0.75
1:A:1030:LEU:HB2	1:A:1037:ILE:HA	1.67	0.75
1:A:1328:LEU:HD21	1:A:1390:ILE:HD11	1.66	0.75
1:A:1867:PHE:O	1:A:1873:GLY:HA2	1.87	0.75
1:A:1541:LEU:N	1:A:1541:LEU:HD22	2.00	0.75
1:A:2049:ASN:HD22	1:A:2055:LEU:HD11	1.52	0.75
1:A:1094:LEU:HD22	1:A:1363:ILE:HB	1.69	0.74
1:A:948:LYS:HE3	1:A:949:VAL:H	1.53	0.74
2:K:153:PHE:HZ	2:K:164:ASN:HD22	1.35	0.74
1:A:303:LYS:NZ	1:A:307:VAL:O	2.20	0.74
1:A:1663:ASN:CG	1:A:1670:ILE:O	2.31	0.74
1:A:250:GLU:OE2	1:A:405:GLN:NE2	2.21	0.73
1:A:1061:ILE:HG13	1:A:1522:LYS:CE	2.18	0.73
1:A:1523:ASP:O	1:A:1525:VAL:N	2.21	0.73
1:A:1155:GLU:HG2	1:A:1289:ARG:HB3	1.70	0.73
1:A:1197:ARG:HG2	1:A:1197:ARG:NH2	2.04	0.73
1:A:938:PHE:H	1:A:948:LYS:HG2	1.54	0.73
1:A:1538:LYS:NZ	1:A:1540:SER:HB3	2.04	0.73
1:A:134:ASN:HD21	1:A:241:ARG:HG3	1.54	0.72
1:A:534:GLU:O	1:A:538:ASN:ND2	2.22	0.72
1:A:922:TYR:CZ	1:A:926:ILE:HG13	2.25	0.72
1:A:1359:GLU:HB2	1:A:1364:LYS:HD3	1.71	0.72
1:A:1520:ILE:HD12	1:A:1520:ILE:C	2.14	0.72
1:A:1520:ILE:HG23	1:A:1526:ILE:HG23	1.72	0.72

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2102:ILE:HD11	1:A:2110:TYR:C	2.14	0.72
1:A:1407:PHE:O	1:A:1415:ALA:N	2.16	0.72
1:A:218:ILE:HA	1:A:221:LEU:HD12	1.72	0.72
1:A:1002:ILE:HG21	1:A:1007:LYS:O	1.90	0.72
1:A:1475:PHE:CZ	1:A:1521:THR:HB	2.25	0.72
1:A:960:LEU:HD21	1:A:1651:GLY:CA	2.19	0.72
1:A:1061:ILE:HG12	1:A:1522:LYS:HE3	1.71	0.72
1:A:1171:TRP:CE2	1:A:1195:THR:CG2	2.73	0.72
1:A:2049:ASN:HB3	1:A:2055:LEU:HD21	1.71	0.71
1:A:1902:THR:HG22	1:A:1903:GLU:H	1.54	0.71
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1556:VAL:C	2.61	0.71
1:A:1677:PHE:HD2	1:A:1705:ILE:HG22	1.56	0.71
1:A:1466:MET:HA	1:A:1471:LYS:HG2	1.73	0.70
1:A:126:ASN:OD1	1:A:127:VAL:N	2.23	0.70
1:A:1857:PHE:HE1	1:A:1864:LYS:HB3	1.57	0.70
1:A:1287:ASN:OD1	1:A:1288:ILE:N	2.23	0.70
1:A:514:GLU:O	1:A:518:ASN:ND2	2.24	0.70
1:A:1430:ILE:H	1:A:1463:TYR:HB3	1.57	0.70
1:A:1130:LEU:HG	1:A:1134:GLU:HG3	1.73	0.70
1:A:95:GLU:N	1:A:95:GLU:OE1	2.25	0.69
1:A:1048:GLU:OE2	1:A:1052:THR:OG1	2.09	0.69
1:A:1520:ILE:HG13	1:A:1527:ILE:H	1.55	0.69
1:A:2299:THR:HG21	1:A:2304:LYS:HE2	1.73	0.69
1:A:1932:ILE:HG13	1:A:1935:ASN:HB2	1.75	0.69
1:A:424:ASP:OD1	1:A:424:ASP:N	2.25	0.69
1:A:1464:SER:OG	1:A:1473:ASN:ND2	2.25	0.69
1:A:712:TYR:HB3	1:A:713:PRO:HD3	1.74	0.69
1:A:1620:GLY:HA3	1:A:1639:PHE:HA	1.74	0.69
1:A:782:ASN:HB3	1:A:786:ASN:HB3	1.75	0.69
1:A:973:ASN:O	1:A:987:LYS:NZ	2.25	0.69
1:A:1725:TYR:O	1:A:1780:LYS:NZ	2.25	0.69
1:A:239:ASP:OD1	1:A:240:VAL:N	2.25	0.69
1:A:364:LEU:HD22	1:A:367:ILE:HD11	1.75	0.69
1:A:1541:LEU:HG	1:A:1556:VAL:CA	2.18	0.69
1:A:340:ASP:OD2	1:A:340:ASP:N	2.26	0.68
1:A:1000:ASN:OD1	1:A:1000:ASN:N	2.17	0.68
1:A:1686:ASP:O	1:A:1714:THR:OG1	2.10	0.68
1:A:1656:MET:O	1:A:1693:ILE:N	2.25	0.68
1:A:1799:THR:O	1:A:1800:PHE:HD1	1.77	0.68
1:A:1802:PRO:O	1:A:1828:ASN:ND2	2.25	0.68
1:A:65:LYS:O	1:A:1669:ASP:HA	1.93	0.68

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:168:HIS:NE2	1:A:525:GLU:OE1	2.23	0.68
1:A:1016:LEU:C	1:A:1016:LEU:HD23	2.18	0.68
1:A:708:VAL:O	1:A:711:THR:CG2	2.41	0.68
1:A:1061:ILE:CG1	1:A:1522:LYS:CE	2.72	0.68
1:A:1718:VAL:HB	1:A:1766:ILE:HG23	1.75	0.68
1:A:232:VAL:O	1:A:237:GLY:N	2.27	0.67
1:A:950:THR:OG1	1:A:951:LEU:N	2.25	0.67
1:A:1591:ILE:HA	1:A:1594:ILE:HD11	1.75	0.67
1:A:1612:ILE:HG22	1:A:1625:ILE:HG22	1.74	0.67
1:A:2315:ASN:ND2	1:A:2316:PHE:O	2.27	0.67
1:A:1062:GLU:O	1:A:1064:LYS:N	2.28	0.67
1:A:1597:LYS:N	1:A:1601:SER:O	2.19	0.67
1:A:890:ILE:HD12	1:A:899:ILE:HG22	1.77	0.67
1:A:1171:TRP:CE2	1:A:1195:THR:HG21	2.30	0.67
1:A:580:HIS:NE2	1:A:650:THR:OG1	2.25	0.67
1:A:1900:PHE:HB2	1:A:1909:PHE:HE2	1.60	0.67
1:A:903:ASP:HB3	1:A:907:GLY:HA2	1.76	0.67
1:A:1958:TYR:HB3	1:A:1980:PHE:HE2	1.60	0.67
1:A:1301:VAL:HG21	1:A:1328:LEU:HA	1.75	0.67
1:A:1488:GLU:HB2	1:A:1493:VAL:HG23	1.74	0.67
1:A:1580:ASP:O	1:A:1584:SER:OG	2.13	0.67
1:A:1794:ASN:O	1:A:1798:SER:OG	2.11	0.67
1:A:396:CYS:O	1:A:400:LEU:HB2	1.95	0.67
1:A:1111:GLU:HG3	1:A:1280:LYS:HD2	1.76	0.67
1:A:1656:MET:HB3	1:A:1692:VAL:HG22	1.76	0.66
1:A:580:HIS:HE2	1:A:650:THR:HG1	1.42	0.66
1:A:1061:ILE:O	1:A:1522:LYS:HE3	1.94	0.66
1:A:1283:TYR:HB2	1:A:1308:TYR:HE2	1.60	0.66
1:A:1511:SER:OG	1:A:1514:LEU:HB2	1.96	0.66
1:A:1860:ILE:O	1:A:1863:ASP:N	2.28	0.66
1:A:1904:ASP:O	1:A:1944:ARG:NH1	2.29	0.66
1:A:1935:ASN:HD22	1:A:1965:ARG:HD3	1.59	0.66
1:A:2026:MET:HE2	1:A:2052:GLY:HA3	1.75	0.66
1:A:770:ILE:HD13	1:A:801:LEU:HD22	1.77	0.66
1:A:89:SER:OG	1:A:90:ASN:ND2	2.29	0.66
1:A:1625:ILE:O	1:A:1633:GLN:N	2.24	0.66
1:A:1171:TRP:CD2	1:A:1195:THR:CG2	2.79	0.66
1:A:1405:LEU:O	1:A:1417:ILE:N	2.28	0.66
1:A:1571:ASN:ND2	1:A:1711:ALA:O	2.29	0.66
1:A:1697:ASN:OD1	1:A:1699:TYR:N	2.27	0.66
1:A:1330:GLN:O	1:A:1388:HIS:NE2	2.28	0.66

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:207:LYS:HG3	1:A:221:LEU:HD13	1.78	0.66
1:A:356:ASP:OD1	1:A:357:LYS:N	2.23	0.65
1:A:1590:ASN:OD1	1:A:1593:SER:OG	2.11	0.65
1:A:2223:TYR:HB3	1:A:2252:MET:H	1.61	0.65
1:A:856:ILE:HG23	1:A:965:PHE:HZ	1.61	0.65
1:A:283:VAL:HG22	1:A:389:ILE:HG12	1.78	0.65
1:A:614:GLU:OE1	1:A:614:GLU:N	2.24	0.65
1:A:1406:THR:OG1	1:A:1415:ALA:O	2.12	0.65
1:A:1513:ASP:OD1	1:A:1513:ASP:N	2.29	0.65
1:A:978:SER:HB3	1:A:983:SER:HA	1.79	0.65
1:A:1343:ASP:HB2	1:A:1345:TRP:HE1	1.61	0.65
1:A:1670:ILE:HD13	1:A:1699:TYR:CD1	2.32	0.65
1:A:278:LYS:HB3	1:A:397:SER:HB2	1.77	0.64
1:A:1050:SER:HB2	1:A:1402:PHE:HE2	1.62	0.64
1:A:1559:ASP:CG	1:A:1560:GLU:H	2.05	0.64
1:A:578:TYR:HD1	1:A:644:ARG:HH21	1.42	0.64
1:A:1171:TRP:CE2	1:A:1195:THR:HG22	2.32	0.64
1:A:1955:GLU:HG2	1:A:1985:ILE:HG23	1.79	0.64
1:A:1349:VAL:HG23	1:A:1407:PHE:HD1	1.63	0.64
1:A:1592:LYS:NZ	1:A:1603:ALA:O	2.20	0.64
1:A:514:GLU:HG2	1:A:518:ASN:HD21	1.61	0.64
1:A:722:ASP:O	1:A:725:SER:OG	2.16	0.64
1:A:1223:LEU:HD11	1:A:1299:PHE:HD2	1.61	0.64
1:A:1566:ILE:HD13	1:A:1613:ILE:HD12	1.80	0.64
1:A:1859:THR:HG22	1:A:1864:LYS:HE3	1.80	0.64
1:A:2016:LYS:HE3	1:A:2017:TYR:H	1.63	0.64
2:K:141:TYR:N	2:K:165:PHE:O	2.30	0.64
2:K:141:TYR:O	2:K:165:PHE:N	2.30	0.64
1:A:102:TRP:NE1	1:A:106:GLN:O	2.31	0.63
1:A:1541:LEU:HD11	1:A:1557:TYR:H	1.59	0.63
1:A:1543:PHE:HB3	1:A:1553:LEU:HA	1.78	0.63
1:A:467:ILE:HG23	1:A:472:PRO:HD2	1.79	0.63
1:A:964:PHE:CZ	1:A:1657:ILE:HG12	2.33	0.63
1:A:562:TYR:HA	1:A:566:LYS:HE2	1.81	0.63
1:A:2142:MET:HE1	1:A:2166:SER:HB3	1.81	0.63
1:A:705:SER:O	1:A:705:SER:OG	2.15	0.63
1:A:1486:VAL:HG12	1:A:1495:ILE:HG23	1.79	0.63
1:A:1758:GLU:OE1	1:A:1818:SER:OG	2.16	0.63
1:A:1864:LYS:HB2	1:A:1895:LEU:HB3	1.80	0.63
1:A:1184:ASP:OD2	1:A:1266:ARG:NH2	2.32	0.63
1:A:1330:GLN:OE1	1:A:1351:ASN:ND2	2.31	0.63

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1637:ILE:HD13	1:A:1685:ILE:HD13	1.81	0.63
1:A:1714:THR:HA	1:A:1761:VAL:O	1.99	0.63
1:A:737:ILE:HD12	1:A:778:TYR:HB3	1.81	0.62
1:A:492:THR:O	1:A:492:THR:OG1	2.13	0.62
1:A:601:LYS:NZ	1:A:745:VAL:O	2.25	0.62
1:A:2279:ILE:HG21	1:A:2284:PHE:HE2	1.64	0.62
1:A:2333:ARG:HB2	1:A:2363:LEU:HD13	1.80	0.62
2:K:144:ASN:HB2	2:K:147:THR:HG22	1.81	0.62
1:A:1914:THR:HB	1:A:1918:ASN:HD21	1.62	0.62
1:A:168:HIS:HE2	1:A:525:GLU:CD	2.07	0.62
1:A:625:THR:HB	1:A:628:GLU:HG3	1.80	0.62
1:A:1520:ILE:HG12	1:A:1527:ILE:H	1.65	0.62
1:A:562:TYR:OH	1:A:593:GLU:OE1	2.18	0.62
1:A:1330:GLN:HB3	1:A:1351:ASN:OD1	2.00	0.62
1:A:160:ASN:OD1	1:A:160:ASN:N	2.32	0.61
1:A:1514:LEU:HD23	1:A:1532:TYR:HB3	1.81	0.61
1:A:417:PRO:O	1:A:421:GLN:NE2	2.26	0.61
1:A:1220:LEU:HD12	1:A:1220:LEU:H	1.65	0.61
1:A:1613:ILE:HG23	1:A:1624:PHE:HB2	1.83	0.61
1:A:1638:LYS:O	1:A:1638:LYS:HG2	1.99	0.61
1:A:1897:THR:OG1	1:A:1909:PHE:O	2.18	0.61
1:A:114:TYR:CE2	1:A:290:LEU:HG	2.36	0.61
1:A:269:SER:O	1:A:269:SER:OG	2.18	0.61
1:A:747:ILE:HD13	1:A:1829:LEU:HD13	1.82	0.61
1:A:113:ASN:HB3	1:A:328:ILE:HG23	1.82	0.61
1:A:1565:GLU:O	1:A:1568:LYS:N	2.29	0.61
1:A:1100:ILE:HD12	1:A:1100:ILE:H	1.66	0.61
1:A:534:GLU:HG2	1:A:538:ASN:HD21	1.66	0.61
1:A:826:GLU:O	1:A:830:ILE:HG13	1.99	0.61
1:A:2181:ASN:OD1	1:A:2181:ASN:N	2.32	0.61
1:A:1472:GLU:HA	1:A:1487:SER:HA	1.83	0.60
1:A:1552:LYS:HG2	1:A:1606:ILE:HD11	1.82	0.60
1:A:2092:ASP:OD2	1:A:2099:SER:HB2	2.01	0.60
1:A:1453:LEU:HD13	1:A:1461:ILE:HD11	1.83	0.60
1:A:1541:LEU:HD11	1:A:1556:VAL:HA	1.75	0.60
1:A:1646:TYR:OH	1:A:1677:PHE:HA	2.01	0.60
1:A:305:ASP:O	1:A:306:SER:OG	2.16	0.60
1:A:1405:LEU:N	1:A:1417:ILE:O	2.35	0.60
1:A:1541:LEU:HD11	1:A:1556:VAL:CA	2.30	0.60
1:A:1972:GLN:HA	1:A:1977:LYS:HA	1.81	0.60
1:A:2152:ILE:HG13	1:A:2158:VAL:HA	1.84	0.60

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:886:SER:HB3	1:A:902:ILE:HG13	1.83	0.60
1:A:890:ILE:HG23	1:A:899:ILE:HG22	1.83	0.60
1:A:1008:VAL:HG12	1:A:1008:VAL:O	2.01	0.60
1:A:1677:PHE:CD2	1:A:1705:ILE:HG22	2.35	0.60
1:A:1107:LEU:HB3	1:A:1112:LEU:HD23	1.83	0.60
1:A:1523:ASP:C	1:A:1525:VAL:N	2.53	0.60
1:A:1326:LEU:HD12	1:A:1327:SER:H	1.66	0.60
1:A:1612:ILE:HD12	1:A:1623:GLU:CD	2.26	0.60
1:A:2013:ILE:N	1:A:2016:LYS:O	2.30	0.60
1:A:667:LEU:HD12	1:A:672:LEU:HD22	1.82	0.59
1:A:900:ARG:HH21	1:A:909:SER:HB3	1.67	0.59
1:A:1868:ASN:ND2	1:A:1876:SER:OG	2.35	0.59
1:A:1354:ARG:NE	1:A:1408:SER:O	2.34	0.59
1:A:2104:ILE:HG22	1:A:2104:ILE:O	2.02	0.59
1:A:316:MET:HE2	1:A:335:HIS:O	2.03	0.59
1:A:1538:LYS:HZ1	1:A:1540:SER:HB3	1.65	0.59
1:A:1462:PRO:HB3	1:A:1475:PHE:CZ	2.38	0.59
1:A:1520:ILE:HG23	1:A:1526:ILE:CG2	2.31	0.59
1:A:1114:LEU:O	1:A:1115:ARG:HD3	2.02	0.59
1:A:251:VAL:HG21	1:A:401:ILE:CD1	2.33	0.59
1:A:881:GLU:OE2	1:A:904:LYS:N	2.35	0.59
1:A:1121:VAL:HG22	1:A:1279:LEU:HD13	1.85	0.59
1:A:1319:GLY:HA3	1:A:1343:ASP:OD1	2.02	0.59
1:A:77:GLU:O	1:A:81:THR:HG23	2.02	0.58
1:A:106:GLN:HE21	1:A:231:LYS:HD2	1.67	0.58
1:A:1171:TRP:CD1	1:A:1195:THR:HG22	2.37	0.58
1:A:1500:MET:O	1:A:1503:SER:OG	2.20	0.58
1:A:1586:LEU:HB3	1:A:1591:ILE:HG21	1.85	0.58
1:A:1983:ASP:OD1	1:A:1985:ILE:HG13	2.03	0.58
1:A:1252:LEU:HD21	1:A:1265:TRP:CD1	2.38	0.58
1:A:60:ILE:HD13	1:A:69:ASN:ND2	2.18	0.58
1:A:219:ASP:HA	1:A:222:ASN:HD22	1.69	0.58
1:A:1475:PHE:CE2	1:A:1521:THR:HB	2.38	0.58
1:A:1552:LYS:CG	1:A:1606:ILE:HD11	2.33	0.58
1:A:1537:ILE:HD13	1:A:1562:GLY:HA2	1.85	0.58
1:A:468:THR:HA	1:A:473:THR:OG1	2.03	0.58
1:A:1145:MET:HE1	1:A:1216:LEU:HD12	1.86	0.58
1:A:210:LEU:HD22	1:A:216:LYS:HD2	1.85	0.58
1:A:939:ASP:N	1:A:948:LYS:HD3	2.18	0.58
1:A:1355:ASP:N	1:A:1367:ASP:O	2.27	0.58
1:A:815:GLU:HB2	1:A:818:GLU:OE1	2.03	0.58

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:960:LEU:CD2	1:A:1651:GLY:CA	2.77	0.58
1:A:1265:TRP:CE2	1:A:1266:ARG:HB2	2.39	0.57
1:A:1709:HIS:HB3	1:A:1712:ASN:HD21	1.68	0.57
1:A:1245:GLU:OE2	1:A:1266:ARG:NH2	2.37	0.57
1:A:1548:LYS:O	1:A:1550:THR:N	2.33	0.57
1:A:1639:PHE:N	1:A:1639:PHE:CD2	2.73	0.57
1:A:3:LEU:HD11	1:A:79:LEU:HD23	1.86	0.57
1:A:1444:VAL:O	1:A:1448:ILE:HG23	2.04	0.57
1:A:1694:ILE:HB	1:A:1720:VAL:HG22	1.86	0.57
1:A:1358:ILE:HG13	1:A:1358:ILE:O	2.03	0.57
1:A:1486:VAL:HG11	1:A:1528:LEU:HD13	1.87	0.57
1:A:1410:LEU:HB2	1:A:1413:ILE:HD12	1.86	0.57
1:A:313:TRP:O	1:A:317:GLN:HG3	2.04	0.57
1:A:1347:ILE:O	1:A:1406:THR:HG22	2.05	0.57
1:A:1480:THR:OG1	1:A:1482:GLU:OE2	2.22	0.57
1:A:2033:THR:HG21	1:A:2038:LYS:HE2	1.86	0.57
1:A:2105:ILE:HG22	1:A:2106:ASN:H	1.69	0.57
1:A:932:LYS:NZ	1:A:959:THR:HG21	2.19	0.57
1:A:1252:LEU:HD21	1:A:1265:TRP:CG	2.39	0.57
1:A:1484:LEU:HD11	1:A:1545:ILE:CD1	2.35	0.57
1:A:1526:ILE:O	1:A:1544:THR:OG1	2.17	0.57
1:A:534:GLU:HA	1:A:537:LYS:HD3	1.86	0.57
1:A:1265:TRP:O	1:A:1275:VAL:HA	2.05	0.57
1:A:1634:PRO:HB3	1:A:1637:ILE:HD12	1.87	0.57
1:A:2103:SER:O	1:A:2103:SER:OG	2.22	0.57
1:A:429:MET:HE1	1:A:452:GLY:O	2.05	0.57
1:A:1234:GLU:HG2	1:A:1278:LYS:HB2	1.87	0.57
1:A:2092:ASP:N	1:A:2097:GLU:O	2.30	0.57
1:A:244:GLU:HG3	1:A:247:LYS:HD2	1.87	0.56
1:A:863:ILE:HA	1:A:866:ILE:HD11	1.87	0.56
1:A:1517:VAL:HG12	1:A:1529:THR:O	2.05	0.56
1:A:180:TYR:HE1	1:A:455:LEU:HD13	1.70	0.56
1:A:881:GLU:CD	1:A:906:THR:H	2.13	0.56
1:A:1004:ASP:HB2	1:A:1007:LYS:HB2	1.88	0.56
1:A:1488:GLU:HG3	1:A:1493:VAL:HB	1.88	0.56
1:A:1981:ASN:OD1	1:A:1982:SER:N	2.39	0.56
1:A:1115:ARG:HG2	1:A:1124:TYR:HD1	1.70	0.56
1:A:1117:GLU:O	1:A:1121:VAL:HG23	2.04	0.56
1:A:1409:ILE:HD11	1:A:1430:ILE:HD12	1.86	0.56
1:A:1514:LEU:CD2	1:A:1532:TYR:HB3	2.36	0.56
1:A:1660:PRO:HD3	1:A:1675:ILE:HD11	1.88	0.56

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:258:GLU:OE2	1:A:408:TYR:OH	2.23	0.56
1:A:997:THR:HB	1:A:1001:THR:HG21	1.88	0.56
1:A:1349:VAL:HG22	1:A:1406:THR:H	1.70	0.56
1:A:903:ASP:CB	1:A:907:GLY:HA2	2.36	0.56
1:A:1031:PRO:HB3	1:A:1554:ASN:HB2	1.88	0.56
1:A:2236:ILE:HG23	1:A:2245:TYR:HD2	1.70	0.56
1:A:49:LEU:HD22	1:A:79:LEU:HD22	1.87	0.56
1:A:856:ILE:HD11	1:A:1652:ASN:HB3	1.88	0.56
1:A:850:SER:HB3	1:A:853:ILE:HB	1.87	0.56
1:A:1245:GLU:HB2	1:A:1249:THR:OG1	2.05	0.56
1:A:1494:LEU:HD13	2:K:157:GLY:HA3	1.88	0.56
1:A:1757:GLU:HG3	1:A:1763:GLN:HB3	1.87	0.56
1:A:2102:ILE:HD13	1:A:2110:TYR:O	2.06	0.56
1:A:425:PHE:O	1:A:429:MET:HB2	2.05	0.56
1:A:521:TRP:CH2	1:A:707:ASN:HB2	2.41	0.56
1:A:1837:VAL:HG12	1:A:1839:ILE:HG13	1.87	0.56
1:A:647:ILE:HD11	1:A:687:ILE:HD13	1.87	0.56
1:A:917:ALA:O	1:A:920:SER:OG	2.21	0.56
1:A:1495:ILE:C	1:A:1496:ILE:HD13	2.31	0.56
1:A:1651:GLY:C	1:A:1653:ARG:H	2.14	0.56
1:A:1754:SER:OG	1:A:1755:THR:N	2.39	0.56
1:A:2016:LYS:HE2	1:A:2053:GLU:HG2	1.88	0.56
1:A:1140:LEU:HB2	1:A:1146:MET:SD	2.46	0.55
1:A:1415:ALA:HA	1:A:1430:ILE:CA	2.30	0.55
1:A:1951:THR:HG22	1:A:1956:VAL:HA	1.88	0.55
1:A:882:SER:HA	1:A:902:ILE:O	2.06	0.55
1:A:1140:LEU:HB2	1:A:1146:MET:HE3	1.88	0.55
1:A:1423:SER:O	1:A:1423:SER:OG	2.23	0.55
1:A:1788:LYS:HD2	1:A:1841:ASP:O	2.06	0.55
1:A:301:ILE:HG21	1:A:347:PHE:CE1	2.40	0.55
1:A:1268:PHE:HA	1:A:1273:ASP:HA	1.89	0.55
1:A:1533:LEU:HD13	1:A:1533:LEU:C	2.31	0.55
1:A:3:LEU:HB2	1:A:82:GLU:HG3	1.89	0.55
1:A:1745:ASN:HB2	1:A:1772:PHE:HE2	1.70	0.55
1:A:1224:PRO:O	1:A:1315:TYR:OH	2.23	0.55
1:A:1636:PHE:CZ	1:A:1638:LYS:HD2	2.41	0.55
1:A:94:VAL:HG22	1:A:369:VAL:HG22	1.88	0.55
1:A:1841:ASP:O	1:A:1842:SER:OG	2.18	0.55
1:A:1967:PHE:O	1:A:1980:PHE:HB2	2.07	0.55
1:A:1447:LYS:O	1:A:1450:TYR:N	2.40	0.55
1:A:179:ILE:HD13	1:A:459:PHE:CD1	2.42	0.55

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:172:PHE:O	1:A:460:TYR:CE1	2.59	0.54
1:A:674:SER:O	1:A:678:THR:HG23	2.07	0.54
1:A:1562:GLY:O	1:A:1565:GLU:HB2	2.06	0.54
1:A:1871:ASN:OD1	1:A:1871:ASN:N	2.40	0.54
1:A:1173:MET:HB3	1:A:1262:GLN:HA	1.89	0.54
1:A:1552:LYS:HG2	1:A:1606:ILE:CD1	2.37	0.54
1:A:70:LYS:O	1:A:70:LYS:NZ	2.27	0.54
1:A:1140:LEU:HB2	1:A:1146:MET:CE	2.38	0.54
1:A:1172:ARG:HD2	1:A:1199:PRO:O	2.08	0.54
1:A:1429:LEU:HD12	1:A:1462:PRO:HG2	1.90	0.54
1:A:1583:MET:HE3	1:A:1605:LEU:O	2.08	0.54
1:A:1846:PHE:HA	1:A:1852:ASN:O	2.08	0.54
1:A:2239:ILE:HD12	1:A:2244:TYR:HB2	1.88	0.54
1:A:1579:SER:OG	1:A:1580:ASP:OD1	2.25	0.54
1:A:1369:ILE:O	1:A:1372:ILE:HG13	2.07	0.54
1:A:1847:LYS:O	1:A:1851:LYS:HA	2.08	0.54
1:A:1868:ASN:HB3	1:A:1871:ASN:OD1	2.07	0.54
1:A:1703:ILE:HB	1:A:1732:ILE:HD13	1.90	0.53
1:A:2296:VAL:HG22	1:A:2303:PHE:HB3	1.90	0.53
1:A:623:ASN:O	1:A:625:THR:N	2.36	0.53
1:A:937:ILE:HA	1:A:948:LYS:HG2	1.90	0.53
1:A:1038:ASP:O	1:A:1062:GLU:HB3	2.07	0.53
1:A:1663:ASN:HA	1:A:1670:ILE:O	2.08	0.53
1:A:117:GLN:OE1	1:A:357:LYS:NZ	2.41	0.53
1:A:1367:ASP:OD1	1:A:1367:ASP:N	2.41	0.53
1:A:1550:THR:HA	1:A:1604:LYS:O	2.08	0.53
1:A:1673:THR:OG1	1:A:1701:ASP:OD1	2.22	0.53
1:A:1440:ASN:HB3	1:A:1443:SER:OG	2.09	0.53
1:A:1689:VAL:O	1:A:1689:VAL:HG12	2.08	0.53
1:A:1494:LEU:HB2	1:A:1496:ILE:HD11	1.90	0.53
1:A:231:LYS:O	1:A:235:ASN:ND2	2.42	0.53
1:A:1169:GLU:HB3	1:A:1200:TYR:HB3	1.90	0.53
1:A:1337:ILE:HD13	1:A:1390:ILE:HG23	1.91	0.53
1:A:1751:ILE:HD11	1:A:1767:ARG:NH1	2.24	0.53
1:A:2057:TYR:CZ	1:A:2061:LEU:HD13	2.43	0.53
1:A:1315:TYR:HB3	1:A:1317:PHE:CE2	2.43	0.53
1:A:2273:GLN:HG3	1:A:2274:TYR:H	1.73	0.53
1:A:176:MET:SD	1:A:456:ARG:HG2	2.49	0.53
1:A:520:LEU:O	1:A:706:VAL:HG21	2.08	0.53
1:A:1701:ASP:OD1	1:A:1701:ASP:N	2.39	0.53
1:A:21:GLU:OE1	1:A:21:GLU:N	2.38	0.53

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1514:LEU:HA	1:A:1531:TYR:O	2.09	0.53
1:A:1541:LEU:CG	1:A:1555:GLY:O	2.56	0.53
1:A:1647:THR:O	1:A:1656:MET:HA	2.08	0.53
1:A:970:ILE:HG13	1:A:971:GLY:H	1.73	0.53
1:A:1469:GLU:O	1:A:1490:SER:N	2.42	0.53
1:A:2033:THR:HB	1:A:2036:GLY:O	2.08	0.53
1:A:695:ASN:OD1	1:A:696:LEU:N	2.42	0.52
1:A:977:GLU:O	1:A:979:LEU:HD22	2.08	0.52
1:A:1413:ILE:HA	1:A:1432:GLY:HA3	1.89	0.52
1:A:2030:VAL:HB	1:A:2039:TYR:HB2	1.91	0.52
1:A:2059:GLY:O	1:A:2070:PHE:N	2.36	0.52
1:A:1709:HIS:HB3	1:A:1712:ASN:ND2	2.24	0.52
1:A:521:TRP:HA	1:A:521:TRP:CE3	2.44	0.52
1:A:741:ASN:HD21	1:A:776:LYS:NZ	2.07	0.52
1:A:855:TYR:HE1	1:A:962:ALA:HB2	1.73	0.52
1:A:1353:VAL:HG21	1:A:1407:PHE:CD2	2.45	0.52
1:A:1520:ILE:HG12	1:A:1527:ILE:O	2.10	0.52
1:A:578:TYR:HD1	1:A:644:ARG:NH2	2.07	0.52
1:A:642:SER:O	1:A:642:SER:OG	2.22	0.52
1:A:689:PRO:HD2	1:A:728:MET:HE2	1.90	0.52
1:A:770:ILE:CD1	1:A:801:LEU:HD22	2.40	0.52
1:A:866:ILE:O	1:A:870:LEU:HG	2.09	0.52
1:A:902:ILE:HG22	1:A:903:ASP:N	2.18	0.52
1:A:1288:ILE:HG22	1:A:1290:ILE:HD11	1.91	0.52
1:A:1327:SER:HA	1:A:1348:ASP:HB2	1.91	0.52
1:A:868:ASP:OD1	1:A:868:ASP:N	2.42	0.52
1:A:882:SER:O	1:A:884:PHE:N	2.43	0.52
1:A:1372:ILE:O	1:A:1374:SER:N	2.42	0.52
1:A:717:LEU:O	1:A:721:LYS:HB2	2.09	0.52
1:A:1173:MET:HG2	1:A:1174:GLU:H	1.73	0.52
1:A:1642:LEU:O	1:A:1676:ASN:ND2	2.42	0.52
1:A:935:ASP:O	1:A:938:PHE:CZ	2.63	0.52
1:A:938:PHE:H	1:A:948:LYS:CG	2.22	0.52
1:A:1002:ILE:HD13	1:A:1007:LYS:O	2.08	0.52
1:A:1030:LEU:N	1:A:1031:PRO:HD3	2.24	0.52
1:A:1256:ARG:HG3	1:A:1263:PHE:O	2.10	0.52
1:A:1356:VAL:HA	1:A:1364:LYS:O	2.10	0.52
1:A:1534:LYS:HD2	1:A:1537:ILE:HB	1.91	0.52
1:A:2113:ASN:OD1	1:A:2119:GLN:NE2	2.42	0.52
1:A:621:TYR:HD1	1:A:621:TYR:H	1.58	0.52
1:A:881:GLU:OE2	1:A:905:GLU:N	2.27	0.52

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1936:VAL:O	1:A:1965:ARG:HA	2.10	0.52
1:A:938:PHE:H	1:A:948:LYS:HD3	1.74	0.52
1:A:1061:ILE:HG12	1:A:1522:LYS:CE	2.39	0.52
1:A:1843:LEU:HB3	1:A:1875:ALA:HB3	1.92	0.52
1:A:304:PRO:HG2	1:A:307:VAL:HG22	1.91	0.52
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:HE2	1.89	0.52
1:A:1613:ILE:CG2	1:A:1624:PHE:HB2	2.40	0.52
1:A:113:ASN:O	1:A:117:GLN:NE2	2.43	0.51
1:A:265:LEU:O	1:A:269:SER:HB3	2.10	0.51
1:A:1055:PRO:HB2	1:A:1057:LEU:HD13	1.91	0.51
1:A:1636:PHE:O	1:A:1637:ILE:HG13	2.10	0.51
1:A:1918:ASN:HD22	1:A:1924:ILE:HG21	1.75	0.51
1:A:1968:LYS:HD2	1:A:1982:SER:C	2.35	0.51
1:A:816:LEU:HA	1:A:819:LYS:HD2	1.91	0.51
1:A:1140:LEU:C	1:A:1142:ASP:H	2.18	0.51
1:A:1315:TYR:HB3	1:A:1317:PHE:HE2	1.75	0.51
1:A:1689:VAL:HG11	1:A:1716:PRO:HG3	1.92	0.51
1:A:1748:SER:HA	1:A:1772:PHE:HB2	1.92	0.51
1:A:1494:LEU:HD22	2:K:158:CYS:SG	2.50	0.51
1:A:633:ASP:OD1	1:A:633:ASP:N	2.36	0.51
1:A:856:ILE:HG23	1:A:965:PHE:CZ	2.42	0.51
1:A:1223:LEU:HD11	1:A:1299:PHE:CD2	2.44	0.51
1:A:1636:PHE:CE2	1:A:1638:LYS:HD2	2.45	0.51
1:A:2258:THR:HA	1:A:2263:HIS:HA	1.91	0.51
1:A:212:ASN:OD1	1:A:213:GLU:HG2	2.10	0.51
1:A:1541:LEU:HD12	1:A:1557:TYR:N	2.19	0.51
1:A:2145:ILE:HB	1:A:2150:PHE:HE1	1.74	0.51
1:A:970:ILE:HG21	1:A:990:VAL:HG21	1.93	0.51
1:A:1353:VAL:HG21	1:A:1407:PHE:CG	2.45	0.51
1:A:2245:TYR:H	1:A:2266:PHE:HE2	1.57	0.51
2:K:167:THR:OG1	2:K:168:LEU:N	2.43	0.51
1:A:1171:TRP:HB2	1:A:1233:TRP:CD1	2.46	0.51
1:A:251:VAL:CG2	1:A:401:ILE:CD1	2.89	0.51
1:A:1293:ASP:O	1:A:1324:TYR:OH	2.27	0.51
1:A:1658:VAL:N	1:A:1693:ILE:O	2.41	0.51
1:A:1879:GLU:HB2	1:A:1888:TYR:HD1	1.75	0.51
1:A:2060:ILE:HG22	1:A:2069:TYR:HD1	1.76	0.51
1:A:1168:CYS:O	1:A:1203:ILE:N	2.43	0.51
1:A:1242:ARG:NE	1:A:1266:ARG:HD2	2.25	0.51
1:A:893:THR:HG23	1:A:896:GLY:O	2.11	0.51
1:A:967:GLN:NE2	1:A:1021:ASP:OD1	2.44	0.51

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1028:GLU:OE1	1:A:1044:ALA:N	2.41	0.51
1:A:1407:PHE:CE2	1:A:1415:ALA:HB3	2.46	0.51
1:A:2019:TYR:CZ	1:A:2031:PHE:HB2	2.46	0.51
1:A:656:LYS:O	1:A:661:THR:OG1	2.28	0.50
1:A:1196:TYR:N	1:A:1196:TYR:CD2	2.77	0.50
1:A:1321:GLY:HA3	1:A:1341:GLU:CD	2.36	0.50
1:A:1739:ILE:HD12	1:A:1844:TYR:CE2	2.46	0.50
1:A:236:SER:O	1:A:236:SER:OG	2.25	0.50
1:A:719:ARG:O	1:A:723:LYS:HE3	2.11	0.50
1:A:637:ILE:HB	1:A:686:ASP:HB3	1.93	0.50
1:A:1354:ARG:HG2	1:A:1368:LEU:HD23	1.92	0.50
2:K:124:PHE:HD1	2:K:124:PHE:H	1.59	0.50
1:A:294:HIS:HB2	1:A:360:ILE:O	2.11	0.50
1:A:866:ILE:HD13	1:A:982:LEU:HD11	1.94	0.50
1:A:1168:CYS:O	1:A:1203:ILE:HG13	2.11	0.50
1:A:1513:ASP:O	1:A:1532:TYR:HB2	2.11	0.50
1:A:1024:PRO:HG2	1:A:1636:PHE:CG	2.47	0.50
1:A:153:THR:O	1:A:153:THR:OG1	2.26	0.50
1:A:964:PHE:HB2	1:A:1023:LEU:HD21	1.94	0.50
1:A:1002:ILE:CG2	1:A:1007:LYS:O	2.59	0.50
1:A:1310:ARG:HH21	1:A:1332:ASN:H	1.58	0.50
1:A:1867:PHE:O	1:A:1873:GLY:CA	2.59	0.50
1:A:2038:LYS:HE3	1:A:2040:PHE:HE1	1.77	0.50
1:A:418:ILE:HA	1:A:421:GLN:NE2	2.26	0.50
1:A:1549:ASN:HD22	1:A:1597:LYS:NZ	2.10	0.50
2:K:161:ASN:OD1	2:K:163:ASN:N	2.31	0.50
1:A:1012:VAL:C	1:A:1014:THR:H	2.19	0.49
1:A:1900:PHE:HB2	1:A:1909:PHE:CE2	2.43	0.49
1:A:970:ILE:HG13	1:A:971:GLY:N	2.26	0.49
1:A:1127:HIS:O	1:A:1131:ALA:N	2.44	0.49
1:A:881:GLU:OE1	1:A:907:GLY:N	2.46	0.49
1:A:1148:GLN:HB2	1:A:1151:LEU:HG	1.94	0.49
1:A:711:THR:HG23	1:A:714:GLY:H	1.78	0.49
1:A:1322:GLY:O	1:A:1343:ASP:HA	2.13	0.49
1:A:1541:LEU:HD22	1:A:1541:LEU:H	1.76	0.49
1:A:2008:SER:HA	1:A:2020:PHE:HB2	1.95	0.49
1:A:2018:PHE:HB3	1:A:2026:MET:SD	2.53	0.49
1:A:2213:ILE:HB	1:A:2224:TYR:HB2	1.94	0.49
1:A:1566:ILE:HD13	1:A:1613:ILE:CD1	2.42	0.49
1:A:2259:PHE:N	1:A:2262:ASN:O	2.42	0.49
1:A:2283:MET:SD	1:A:2304:LYS:NZ	2.86	0.49

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
2:K:124:PHE:HZ	2:K:174:ILE:HG12	1.78	0.49
1:A:333:SER:OG	1:A:336:PHE:HB3	2.12	0.49
1:A:396:CYS:SG	1:A:482:LEU:HD22	2.53	0.49
1:A:807:ASN:OD1	1:A:1838:TYR:HB2	2.11	0.49
1:A:1441:SER:HA	1:A:1444:VAL:HB	1.93	0.49
1:A:1484:LEU:O	1:A:1486:VAL:HG13	2.13	0.49
1:A:1697:ASN:OD1	1:A:1698:ILE:N	2.46	0.49
1:A:2181:ASN:ND2	1:A:2187:VAL:HG11	2.22	0.49
1:A:313:TRP:CD1	1:A:317:GLN:HE21	2.30	0.49
1:A:708:VAL:HG11	1:A:788:ILE:HG21	1.93	0.49
1:A:1139:LEU:CD1	1:A:1218:LYS:HE2	2.43	0.49
1:A:1430:ILE:HG12	1:A:1463:TYR:CD2	2.47	0.49
1:A:2039:TYR:CZ	1:A:2041:ALA:HA	2.47	0.49
1:A:329:PRO:O	1:A:330:GLU:HB2	2.13	0.49
1:A:1350:ASP:OD1	1:A:1351:ASN:N	2.45	0.49
1:A:1538:LYS:HZ2	1:A:1540:SER:HB3	1.75	0.49
1:A:1806:VAL:C	1:A:1808:GLY:H	2.21	0.49
1:A:2366:SER:OG	1:A:2367:GLU:N	2.45	0.49
1:A:717:LEU:HD22	1:A:779:ILE:HG13	1.94	0.49
1:A:1125:PHE:HE2	1:A:1279:LEU:HD21	1.78	0.49
1:A:1955:GLU:HG2	1:A:1985:ILE:HA	1.94	0.49
1:A:118:TRP:O	1:A:122:ASN:ND2	2.45	0.48
1:A:632:ILE:HD11	1:A:636:ARG:NH1	2.28	0.48
1:A:1304:ILE:N	1:A:1331:TYR:HD2	2.11	0.48
1:A:1310:ARG:NH2	1:A:1332:ASN:H	2.11	0.48
1:A:2265:TYR:CE1	1:A:2279:ILE:HD12	2.48	0.48
1:A:547:ASP:HB3	1:A:758:HIS:CE1	2.47	0.48
1:A:947:LYS:O	1:A:948:LYS:HB2	2.12	0.48
1:A:958:ASN:C	1:A:960:LEU:H	2.21	0.48
1:A:1335:ILE:HG22	1:A:1337:ILE:HD11	1.96	0.48
2:K:154:LYS:N	2:K:154:LYS:HD2	2.29	0.48
1:A:1231:PHE:CD1	1:A:1281:PRO:HB3	2.48	0.48
1:A:1115:ARG:HB2	1:A:1279:LEU:HB2	1.95	0.48
1:A:1172:ARG:HH21	1:A:1201:LEU:HD21	1.77	0.48
1:A:1385:LEU:O	1:A:1388:HIS:N	2.42	0.48
1:A:2092:ASP:CG	1:A:2099:SER:HB2	2.39	0.48
1:A:153:THR:HG23	1:A:171:PHE:CE1	2.49	0.48
1:A:248:THR:O	1:A:248:THR:OG1	2.32	0.48
1:A:961:ASN:HD22	1:A:1653:ARG:HH12	1.61	0.48
1:A:1317:PHE:HB2	1:A:1337:ILE:HA	1.95	0.48
1:A:1676:ASN:HA	1:A:1704:ASN:HB2	1.93	0.48

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:2233:TYR:HB2	1:A:2246:PHE:CE2	2.48	0.48
1:A:190:TYR:HD1	1:A:205:ILE:HG21	1.79	0.48
1:A:831:SER:O	1:A:835:THR:HG23	2.14	0.48
1:A:869:ALA:O	1:A:873:LEU:HD13	2.12	0.48
1:A:1168:CYS:SG	1:A:1229:ARG:HD2	2.53	0.48
1:A:1172:ARG:HD3	1:A:1198:GLU:HB2	1.96	0.48
1:A:1310:ARG:HB2	1:A:1333:MET:HE2	1.95	0.48
1:A:1885:LYS:NZ	1:A:1922:GLU:OE2	2.30	0.48
1:A:1886:ASN:HB2	1:A:1923:ALA:HB3	1.94	0.48
1:A:2236:ILE:HG23	1:A:2245:TYR:CD2	2.48	0.48
1:A:2329:LEU:HB3	1:A:2334:TYR:CE2	2.48	0.48
1:A:128:ASN:HB3	1:A:238:ASN:HB2	1.94	0.48
1:A:148:SER:O	1:A:148:SER:OG	2.31	0.48
1:A:1030:LEU:HG	1:A:1612:ILE:HD11	1.95	0.48
1:A:1113:ILE:HA	1:A:1280:LYS:HD3	1.96	0.48
1:A:1302:PRO:HB2	1:A:1304:ILE:HG13	1.96	0.48
1:A:1541:LEU:HG	1:A:1555:GLY:O	2.13	0.48
1:A:1592:LYS:HG3	1:A:1602:ASN:HD22	1.78	0.48
1:A:1925:ASP:HB2	1:A:1943:TYR:CD1	2.49	0.48
1:A:2060:ILE:HA	1:A:2069:TYR:HA	1.95	0.48
1:A:127:VAL:HG12	1:A:236:SER:OG	2.13	0.48
1:A:1441:SER:OG	1:A:1499:TYR:O	2.31	0.48
1:A:1619:ILE:CG2	1:A:1641:THR:HG23	2.26	0.48
1:A:1783:PHE:N	1:A:1791:ILE:O	2.38	0.48
1:A:1928:GLY:O	1:A:1939:PHE:N	2.45	0.48
1:A:1990:PHE:HA	1:A:1998:PHE:O	2.13	0.48
1:A:689:PRO:CD	1:A:728:MET:HE2	2.43	0.48
1:A:961:ASN:ND2	1:A:1653:ARG:HH12	2.11	0.48
1:A:1220:LEU:HA	1:A:1298:SER:O	2.14	0.48
1:A:2016:LYS:NZ	1:A:2054:ALA:HB3	2.28	0.48
1:A:2025:GLU:OE2	1:A:2025:GLU:N	2.46	0.48
1:A:2063:PHE:O	1:A:2066:LYS:HD2	2.13	0.48
1:A:2102:ILE:CD1	1:A:2110:TYR:C	2.83	0.48
1:A:2329:LEU:HB3	1:A:2334:TYR:HE2	1.78	0.48
1:A:122:ASN:OD1	1:A:364:LEU:HB2	2.13	0.47
1:A:1691:LYS:HG3	1:A:1717:GLU:O	2.13	0.47
1:A:2047:LEU:HD12	1:A:2055:LEU:HD13	1.95	0.47
1:A:404:ILE:O	1:A:408:TYR:HD1	1.97	0.47
1:A:1559:ASP:CG	1:A:1560:GLU:N	2.72	0.47
1:A:1569:PHE:CD2	1:A:1585:PHE:HB2	2.48	0.47
1:A:2288:GLU:N	1:A:2288:GLU:OE1	2.46	0.47

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:817:GLU:O	1:A:820:VAL:HG13	2.14	0.47
1:A:1004:ASP:CB	1:A:1007:LYS:HB2	2.44	0.47
1:A:1252:LEU:HD23	1:A:1253:ASP:N	2.28	0.47
1:A:1379:GLU:HB2	1:A:1382:LYS:O	2.14	0.47
1:A:1857:PHE:CE1	1:A:1864:LYS:HE2	2.49	0.47
1:A:2150:PHE:HA	1:A:2184:GLY:O	2.14	0.47
1:A:194:LYS:HD2	1:A:194:LYS:HA	1.75	0.47
1:A:1029:GLY:C	1:A:1031:PRO:HD3	2.40	0.47
1:A:1125:PHE:HB3	1:A:1248:GLY:HA3	1.97	0.47
1:A:1509:TYR:OH	1:A:1548:LYS:O	2.32	0.47
1:A:2227:PRO:HG3	1:A:2233:TYR:CE1	2.50	0.47
1:A:174:LYS:HD3	1:A:177:GLN:NE2	2.29	0.47
1:A:1909:PHE:HA	1:A:1922:GLU:O	2.15	0.47
1:A:2347:VAL:HG22	1:A:2354:TYR:HB2	1.95	0.47
1:A:186:PHE:HB2	1:A:209:TYR:CE2	2.49	0.47
1:A:547:ASP:HB3	1:A:758:HIS:ND1	2.30	0.47
1:A:1145:MET:HE1	1:A:1215:ASP:O	2.15	0.47
1:A:319:GLU:HG2	1:A:333:SER:HA	1.97	0.47
1:A:1089:GLY:C	1:A:1091:SER:H	2.23	0.47
1:A:1139:LEU:HD11	1:A:1218:LYS:HZ1	1.70	0.47
1:A:1322:GLY:H	1:A:1324:TYR:HE2	1.63	0.47
1:A:1477:ASN:OD1	1:A:1478:CYS:N	2.46	0.47
1:A:1876:SER:O	1:A:1893:GLY:HA2	2.15	0.47
1:A:1968:LYS:HE2	1:A:1983:ASP:HA	1.97	0.47
1:A:2070:PHE:HA	1:A:2075:THR:O	2.14	0.47
1:A:889:ASP:OD1	1:A:889:ASP:N	2.48	0.47
1:A:1343:ASP:OD2	1:A:1343:ASP:N	2.40	0.47
1:A:1614:SER:OG	1:A:1615:GLY:N	2.47	0.47
1:A:1847:LYS:HG3	1:A:1849:PRO:HD2	1.97	0.47
1:A:106:GLN:H	1:A:224:TYR:HH	1.57	0.47
1:A:415:LEU:HG	1:A:419:ILE:HD11	1.95	0.47
1:A:560:LYS:O	1:A:564:LEU:HB2	2.14	0.47
1:A:881:GLU:HG2	1:A:905:GLU:CB	2.39	0.47
1:A:1297:ARG:HB2	1:A:1324:TYR:HA	1.97	0.47
1:A:2193:VAL:HG12	1:A:2195:VAL:HG22	1.97	0.47
1:A:180:TYR:CE1	1:A:455:LEU:HD13	2.50	0.47
1:A:251:VAL:HG22	1:A:401:ILE:HD12	1.97	0.47
1:A:608:LEU:HD12	1:A:609:PHE:N	2.30	0.47
1:A:1811:ASN:OD1	1:A:1812:TYR:N	2.48	0.47
1:A:1287:ASN:OD1	1:A:1316:SER:HB2	2.15	0.46
1:A:1600:LYS:HD2	1:A:1600:LYS:HA	1.65	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1996:LYS:HG2	1:A:2025:GLU:HB2	1.96	0.46
1:A:1227:PRO:HG2	1:A:1283:TYR:CG	2.50	0.46
1:A:1549:ASN:HB3	1:A:1597:LYS:NZ	2.30	0.46
1:A:2043:HIS:HB2	1:A:2051:GLU:HG2	1.97	0.46
1:A:6:ARG:NH1	1:A:28:LEU:O	2.47	0.46
1:A:149:ALA:O	1:A:153:THR:HG22	2.15	0.46
1:A:218:ILE:O	1:A:218:ILE:HG22	2.15	0.46
1:A:465:THR:HG22	1:A:469:LEU:HD22	1.96	0.46
1:A:1566:ILE:HG13	1:A:1566:ILE:O	2.15	0.46
1:A:1882:ILE:HB	1:A:1887:TYR:HE2	1.80	0.46
1:A:114:TYR:CD2	1:A:290:LEU:HG	2.50	0.46
1:A:286:ASP:O	1:A:288:ASP:N	2.48	0.46
1:A:948:LYS:HD2	1:A:948:LYS:HA	1.46	0.46
1:A:1514:LEU:HD23	1:A:1532:TYR:CB	2.45	0.46
1:A:1229:ARG:HD3	1:A:1231:PHE:CE1	2.51	0.46
1:A:1587:GLU:HA	1:A:1591:ILE:HG22	1.98	0.46
1:A:1697:ASN:OD1	1:A:1697:ASN:C	2.58	0.46
1:A:183:GLN:NE2	1:A:261:GLU:O	2.44	0.46
1:A:553:SER:O	1:A:555:ASN:N	2.49	0.46
1:A:703:SER:O	1:A:703:SER:OG	2.30	0.46
1:A:721:LYS:HE3	1:A:721:LYS:HB3	1.55	0.46
1:A:1139:LEU:CD1	1:A:1218:LYS:CE	2.85	0.46
1:A:1908:TYR:CZ	1:A:1910:ALA:HB2	2.51	0.46
1:A:1979:TYR:HD2	1:A:1987:GLN:HB2	1.81	0.46
1:A:40:ASN:OD1	1:A:41:THR:N	2.47	0.46
1:A:270:ASP:OD2	1:A:385:ASN:ND2	2.49	0.46
1:A:608:LEU:HD12	1:A:609:PHE:H	1.80	0.46
1:A:668:ASP:OD2	1:A:668:ASP:N	2.45	0.46
1:A:1390:ILE:HG22	1:A:1392:PHE:CE2	2.51	0.46
1:A:2213:ILE:HD13	1:A:2213:ILE:HA	1.79	0.46
1:A:939:ASP:HB3	1:A:948:LYS:HD2	1.98	0.46
1:A:1496:ILE:HG22	1:A:1497:LYS:H	1.80	0.46
1:A:1686:ASP:OD1	1:A:1712:ASN:HB3	2.16	0.46
2:K:153:PHE:HZ	2:K:164:ASN:ND2	2.08	0.46
1:A:991:TYR:O	1:A:1011:LEU:HD11	2.15	0.46
1:A:1145:MET:HE2	1:A:1221:MET:HE3	1.98	0.46
1:A:1197:ARG:NH2	1:A:1197:ARG:CG	2.73	0.46
1:A:1625:ILE:N	1:A:1633:GLN:O	2.45	0.46
1:A:1825:TYR:O	1:A:1833:VAL:HG23	2.16	0.46
1:A:1930:LEU:N	1:A:1937:TYR:O	2.46	0.46
1:A:1981:ASN:N	1:A:1985:ILE:O	2.44	0.46

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1045:SER:O	1:A:1047:LYS:N	2.44	0.46
1:A:1341:GLU:HG2	1:A:1342:ASN:H	1.81	0.46
1:A:1531:TYR:CD1	1:A:1531:TYR:C	2.94	0.46
1:A:1930:LEU:HB2	1:A:1939:PHE:HE2	1.80	0.46
1:A:2245:TYR:HE1	1:A:2257:ILE:HG12	1.81	0.46
1:A:576:ARG:HG3	1:A:578:TYR:CZ	2.51	0.45
1:A:597:ASN:ND2	1:A:762:TRP:HH2	2.14	0.45
1:A:1152:VAL:HG22	1:A:1226:ALA:HB1	1.97	0.45
1:A:1162:SER:HA	1:A:1212:GLU:HG3	1.98	0.45
1:A:1171:TRP:CZ2	1:A:1195:THR:HG21	2.51	0.45
1:A:4:VAL:HB	1:A:8:GLN:HB3	1.97	0.45
1:A:1532:TYR:O	1:A:1532:TYR:CG	2.69	0.45
1:A:1885:LYS:HB3	1:A:1922:GLU:HG3	1.98	0.45
1:A:436:LEU:HD22	1:A:448:ILE:HG23	1.98	0.45
1:A:627:SER:C	1:A:628:GLU:HG2	2.41	0.45
1:A:1955:GLU:OE1	1:A:1956:VAL:N	2.49	0.45
1:A:2030:VAL:HG11	1:A:2068:TYR:CE1	2.52	0.45
1:A:2308:HIS:CG	1:A:2309:GLN:N	2.85	0.45
1:A:2321:ILE:HB	1:A:2323:TYR:CZ	2.50	0.45
1:A:63:TYR:N	1:A:63:TYR:CD1	2.84	0.45
1:A:106:GLN:NE2	1:A:227:GLU:O	2.49	0.45
1:A:410:ILE:HD12	1:A:490:ILE:HD13	1.97	0.45
1:A:634:LYS:HE3	1:A:634:LYS:HB2	1.58	0.45
1:A:1532:TYR:O	1:A:1532:TYR:CD2	2.70	0.45
1:A:1558:LEU:HG	1:A:1562:GLY:C	2.42	0.45
1:A:1667:SER:O	1:A:1667:SER:OG	2.26	0.45
1:A:1712:ASN:O	1:A:1760:LYS:HE3	2.16	0.45
1:A:2049:ASN:ND2	1:A:2055:LEU:HD11	2.26	0.45
1:A:6:ARG:HA	1:A:31:LEU:HD23	1.99	0.45
1:A:400:LEU:HD12	1:A:478:ALA:CB	2.47	0.45
1:A:521:TRP:HA	1:A:521:TRP:HE3	1.81	0.45
1:A:1096:PRO:HB2	1:A:1100:ILE:HG12	1.99	0.45
1:A:1228:ASP:O	1:A:1284:GLU:N	2.40	0.45
1:A:1289:ARG:HH21	1:A:1318:TYR:HD1	1.64	0.45
1:A:1380:ASP:O	1:A:1381:ASN:ND2	2.49	0.45
1:A:1381:ASN:O	1:A:1391:ASN:HA	2.17	0.45
1:A:1382:LYS:HE3	1:A:1382:LYS:HB3	1.57	0.45
1:A:1545:ILE:O	1:A:1545:ILE:HG12	2.16	0.45
1:A:132:ASP:HB3	1:A:135:ALA:HB3	1.98	0.45
1:A:138:ILE:HG21	1:A:265:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:217:ASP:OD1	1:A:218:ILE:N	2.50	0.45

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:311:VAL:HG12	1:A:311:VAL:O	2.17	0.45
1:A:612:ASN:OD1	1:A:612:ASN:N	2.29	0.45
1:A:870:LEU:N	1:A:870:LEU:HD23	2.31	0.45
1:A:2067:ILE:HD12	1:A:2114:ASP:O	2.15	0.45
1:A:2130:PHE:HB3	1:A:2157:LEU:HA	1.98	0.45
1:A:278:LYS:HE3	1:A:278:LYS:HB2	1.55	0.45
1:A:338:THR:O	1:A:338:THR:OG1	2.27	0.45
1:A:746:ARG:HG2	1:A:762:TRP:CE3	2.52	0.45
1:A:1131:ALA:HA	1:A:1148:GLN:NE2	2.32	0.45
1:A:1483:GLY:HA3	1:A:1498:VAL:HG12	1.99	0.45
1:A:2037:PHE:CG	1:A:2096:ALA:HB2	2.52	0.45
1:A:161:LEU:C	1:A:161:LEU:CD2	2.90	0.45
1:A:166:PHE:CG	1:A:166:PHE:O	2.70	0.45
1:A:800:THR:O	1:A:804:GLU:HG3	2.17	0.45
1:A:1434:LEU:HD22	1:A:1487:SER:HB2	1.98	0.45
1:A:251:VAL:CG2	1:A:401:ILE:HD12	2.47	0.45
1:A:1121:VAL:HG13	1:A:1279:LEU:HD21	1.99	0.45
1:A:1132:GLU:HG2	1:A:1207:LEU:HD11	1.98	0.45
1:A:1375:LYS:O	1:A:1385:LEU:HA	2.17	0.45
1:A:1438:MET:HE1	1:A:1496:ILE:HG21	1.98	0.45
1:A:226:GLU:O	1:A:228:SER:N	2.49	0.45
1:A:313:TRP:NE1	1:A:317:GLN:HE21	2.15	0.45
1:A:559:ASP:OD1	1:A:560:LYS:N	2.50	0.45
1:A:1016:LEU:C	1:A:1016:LEU:CD2	2.86	0.45
1:A:1548:LYS:HD3	1:A:1548:LYS:HA	1.63	0.45
1:A:1689:VAL:CG1	1:A:1716:PRO:HG3	2.46	0.45
1:A:1738:SER:HB3	1:A:1787:ASP:OD2	2.17	0.45
1:A:1809:LEU:C	1:A:1811:ASN:H	2.25	0.45
1:A:2182:ILE:HB	1:A:2185:GLN:HB2	1.99	0.45
2:K:169:GLU:OE1	2:K:169:GLU:N	2.45	0.45
1:A:247:LYS:HB3	1:A:247:LYS:HE3	1.47	0.44
1:A:264:ASN:HD21	1:A:466:THR:HG21	1.81	0.44
1:A:623:ASN:OD1	1:A:624:PRO:HD2	2.17	0.44
1:A:729:PRO:C	1:A:731:ILE:H	2.25	0.44
1:A:881:GLU:O	1:A:903:ASP:HA	2.17	0.44
1:A:1092:ILE:H	1:A:1092:ILE:HG13	1.52	0.44
1:A:1227:PRO:HG2	1:A:1283:TYR:CD1	2.52	0.44
1:A:1507:PHE:CD1	1:A:1507:PHE:N	2.84	0.44
1:A:1994:ASN:OD1	1:A:1994:ASN:N	2.50	0.44
1:A:2026:MET:HE3	1:A:2027:GLN:O	2.17	0.44
1:A:470:SER:HA	1:A:474:ILE:HG21	1.99	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:959:THR:HG22	1:A:959:THR:O	2.18	0.44
1:A:1179:HIS:HD1	1:A:1188:PHE:HD1	1.64	0.44
1:A:1401:GLY:HA2	1:A:1421:LEU:HD12	1.99	0.44
1:A:1495:ILE:O	1:A:1496:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:1962:ASP:OD1	1:A:1963:THR:N	2.50	0.44
1:A:2044:ASP:HB3	1:A:2046:ASP:OD2	2.16	0.44
1:A:220:GLU:H	1:A:220:GLU:HG2	1.25	0.44
1:A:288:ASP:HB2	1:A:516:GLU:HG2	1.98	0.44
1:A:1736:ASP:OD2	1:A:1740:ARG:NH1	2.50	0.44
1:A:1980:PHE:CD1	1:A:1986:MET:HA	2.53	0.44
1:A:2027:GLN:CD	1:A:2027:GLN:H	2.25	0.44
1:A:2275:GLY:N	1:A:2286:PHE:O	2.28	0.44
1:A:830:ILE:O	1:A:833:ILE:HG22	2.18	0.44
1:A:1231:PHE:CE1	1:A:1281:PRO:HB3	2.52	0.44
1:A:2098:ALA:O	1:A:2100:ILE:CG1	2.54	0.44
2:K:141:TYR:CE1	2:K:152:ARG:HB3	2.52	0.44
1:A:923:ALA:O	1:A:927:THR:OG1	2.18	0.44
1:A:1317:PHE:HD1	1:A:1345:TRP:CZ3	2.35	0.44
1:A:1486:VAL:O	1:A:1486:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:2037:PHE:CD2	1:A:2096:ALA:HB2	2.52	0.44
1:A:95:GLU:HB3	1:A:97:ASN:HD21	1.82	0.44
1:A:1011:LEU:O	1:A:1015:ALA:CB	2.66	0.44
1:A:1102:ALA:HB1	1:A:1124:TYR:CE2	2.51	0.44
1:A:1291:SER:HA	1:A:1318:TYR:CD2	2.53	0.44
1:A:1929:LYS:HD3	1:A:1952:LEU:HD21	2.00	0.44
1:A:74:LYS:NZ	1:A:77:GLU:OE1	2.39	0.44
1:A:273:ARG:HE	1:A:273:ARG:HB3	1.57	0.44
1:A:378:PHE:HZ	1:A:499:LEU:O	2.00	0.44
1:A:495:LEU:HD23	1:A:495:LEU:H	1.82	0.44
1:A:870:LEU:HD22	1:A:885:ILE:HD11	1.99	0.44
1:A:1289:ARG:NH1	1:A:1316:SER:HB3	2.32	0.44
1:A:1908:TYR:O	1:A:1923:ALA:HA	2.18	0.44
1:A:841:ARG:O	1:A:842:ILE:HD13	2.17	0.44
1:A:941:VAL:HG13	1:A:941:VAL:O	2.18	0.44
1:A:1289:ARG:HH11	1:A:1316:SER:HB3	1.83	0.44
1:A:1606:ILE:O	1:A:1607:LEU:HD13	2.18	0.44
1:A:48:LYS:O	1:A:52:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:101:ILE:HD12	1:A:284:TYR:CE1	2.52	0.44
1:A:166:PHE:O	1:A:166:PHE:CD2	2.70	0.44
1:A:415:LEU:O	1:A:419:ILE:HG13	2.18	0.44
1:A:578:TYR:HB3	1:A:644:ARG:CB	2.48	0.44

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1242:ARG:HE	1:A:1266:ARG:HH11	1.66	0.44
1:A:1440:ASN:O	1:A:1443:SER:OG	2.28	0.44
1:A:1523:ASP:O	1:A:1525:VAL:HG23	2.18	0.44
1:A:1652:ASN:ND2	1:A:1657:ILE:CD1	2.81	0.44
1:A:1930:LEU:O	1:A:1936:VAL:HA	2.18	0.44
1:A:1930:LEU:HD21	1:A:1932:ILE:HG23	2.00	0.44
1:A:2235:GLY:HA2	1:A:2245:TYR:CE2	2.53	0.44
1:A:2306:PHE:CD1	1:A:2320:SER:HB2	2.53	0.44
1:A:548:ASP:OD2	1:A:549:ASN:N	2.50	0.43
1:A:900:ARG:HG2	1:A:911:PHE:HA	2.00	0.43
1:A:1355:ASP:CG	1:A:1369:ILE:HG12	2.43	0.43
1:A:1458:GLN:HG3	1:A:1461:ILE:HG12	2.00	0.43
1:A:1950:GLN:O	1:A:1957:TYR:N	2.49	0.43
1:A:222:ASN:HA	1:A:225:ILE:HD12	2.00	0.43
1:A:317:GLN:O	1:A:321:ILE:HG13	2.18	0.43
1:A:680:ILE:HG22	1:A:727:LEU:HD23	1.99	0.43
1:A:1652:ASN:OD1	1:A:1652:ASN:N	2.51	0.43
1:A:1683:TYR:HE1	1:A:1711:ALA:HB1	1.83	0.43
1:A:1206:VAL:O	1:A:1254:ARG:NH2	2.52	0.43
1:A:1541:LEU:CD1	1:A:1557:TYR:CB	2.96	0.43
1:A:1541:LEU:HD13	1:A:1557:TYR:HB3	1.99	0.43
1:A:193:GLN:C	1:A:195:GLU:H	2.26	0.43
1:A:806:ARG:O	1:A:809:SER:N	2.50	0.43
1:A:1543:PHE:HA	1:A:1554:ASN:OD1	2.18	0.43
1:A:2102:ILE:HD11	1:A:2109:LYS:O	2.18	0.43
1:A:2169:TYR:CE1	1:A:2230:LYS:HE2	2.53	0.43
1:A:2216:SER:HB2	1:A:2220:SER:HA	2.01	0.43
1:A:2225:PHE:CE1	1:A:2227:PRO:HB3	2.52	0.43
1:A:384:ILE:HG12	1:A:386:GLN:HG3	2.00	0.43
1:A:617:GLU:OE1	1:A:634:LYS:HA	2.19	0.43
1:A:705:SER:HB2	1:A:790:VAL:HG11	1.99	0.43
1:A:1172:ARG:HE	1:A:1201:LEU:HG	1.83	0.43
1:A:1484:LEU:CD2	1:A:1528:LEU:HD21	2.49	0.43
1:A:1788:LYS:HB3	1:A:1791:ILE:HD11	2.00	0.43
1:A:2265:TYR:HE1	1:A:2279:ILE:HD12	1.82	0.43
1:A:138:ILE:HD13	1:A:138:ILE:HA	1.79	0.43
1:A:385:ASN:OD1	1:A:385:ASN:N	2.41	0.43
1:A:1289:ARG:HA	1:A:1289:ARG:HD2	1.76	0.43
1:A:1333:MET:HE2	1:A:1333:MET:HB3	1.84	0.43
1:A:2013:ILE:HD12	1:A:2018:PHE:HD2	1.83	0.43
1:A:313:TRP:HA	1:A:313:TRP:CE3	2.54	0.43

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:648:LYS:HG3	1:A:649:LEU:N	2.33	0.43
1:A:848:LEU:HD21	1:A:1807:GLU:HB3	1.99	0.43
1:A:929:GLU:OE1	1:A:962:ALA:HB3	2.18	0.43
1:A:1094:LEU:HB2	1:A:1362:LYS:NZ	2.33	0.43
1:A:1187:HIS:HA	1:A:1267:PHE:HB2	2.00	0.43
1:A:1257:ASP:HA	1:A:1260:GLU:CD	2.43	0.43
1:A:1416:VAL:HB	1:A:1429:LEU:HD23	2.00	0.43
1:A:1470:GLY:HA3	1:A:1489:LEU:HA	1.99	0.43
1:A:1646:TYR:O	1:A:1647:THR:OG1	2.32	0.43
1:A:1810:LEU:O	1:A:1810:LEU:HG	2.19	0.43
1:A:1879:GLU:OE1	1:A:1909:PHE:HE1	2.01	0.43
1:A:1913:ASP:HA	1:A:1917:GLU:HA	1.99	0.43
1:A:56:THR:CG2	1:A:72:LEU:HB3	2.49	0.43
1:A:2000:PHE:HA	1:A:2005:VAL:O	2.19	0.43
1:A:558:THR:HG21	1:A:620:TYR:CE1	2.53	0.43
1:A:922:TYR:O	1:A:926:ILE:HB	2.19	0.43
1:A:1061:ILE:O	1:A:1522:LYS:CE	2.64	0.43
1:A:1115:ARG:HG2	1:A:1124:TYR:CD1	2.50	0.43
1:A:1807:GLU:H	1:A:1807:GLU:HG3	1.48	0.43
1:A:2169:TYR:CZ	1:A:2230:LYS:HE2	2.54	0.43
1:A:527:ARG:O	1:A:527:ARG:HD3	2.19	0.43
1:A:709:GLU:CD	1:A:709:GLU:H	2.25	0.43
1:A:832:ASN:O	1:A:836:GLN:HG2	2.19	0.43
1:A:1025:THR:HA	1:A:1621:GLN:HE22	1.84	0.43
1:A:1158:PHE:HB2	1:A:1292:LEU:HA	2.00	0.43
1:A:1237:TRP:CD1	1:A:1272:ALA:HB3	2.53	0.43
1:A:1383:ILE:HD11	1:A:1421:LEU:HD21	2.00	0.43
1:A:1457:LEU:HD22	1:A:1457:LEU:HA	1.80	0.43
1:A:1533:LEU:HD13	1:A:1534:LYS:N	2.34	0.43
1:A:1582:LEU:HA	1:A:1632:ILE:HD11	2.01	0.43
1:A:2011:THR:O	1:A:2017:TYR:HA	2.19	0.43
1:A:2273:GLN:HG3	1:A:2274:TYR:N	2.34	0.43
1:A:161:LEU:HD23	1:A:161:LEU:O	2.18	0.42
1:A:217:ASP:HB3	1:A:220:GLU:CG	2.49	0.42
1:A:457:VAL:HG22	1:A:463:ALA:O	2.19	0.42
1:A:979:LEU:HD23	1:A:1662:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:1411:GLU:CD	1:A:1411:GLU:H	2.27	0.42
1:A:1505:PRO:HA	1:A:1506:PRO:HD3	1.86	0.42
1:A:1996:LYS:HE2	1:A:2025:GLU:O	2.19	0.42
1:A:48:LYS:HA	1:A:48:LYS:HD2	1.75	0.42
1:A:240:VAL:C	1:A:242:ASN:H	2.27	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1163:ILE:HD11	1:A:1211:LYS:O	2.18	0.42
1:A:1594:ILE:H	1:A:1594:ILE:HG13	1.57	0.42
1:A:1729:LYS:HD3	1:A:1729:LYS:HA	1.83	0.42
1:A:1882:ILE:HB	1:A:1887:TYR:CE2	2.54	0.42
1:A:654:HIS:CE1	1:A:758:HIS:CE1	3.07	0.42
1:A:784:LYS:HE2	1:A:784:LYS:HB2	1.76	0.42
1:A:1001:THR:HG23	1:A:1002:ILE:N	2.34	0.42
1:A:1857:PHE:HZ	1:A:1895:LEU:HD22	1.84	0.42
1:A:2353:GLU:C	1:A:2354:TYR:HD1	2.26	0.42
1:A:926:ILE:O	1:A:930:ILE:HG13	2.19	0.42
1:A:1434:LEU:HD11	1:A:1438:MET:HE2	2.01	0.42
1:A:226:GLU:C	1:A:228:SER:H	2.26	0.42
1:A:1054:ASP:N	1:A:1055:PRO:HD2	2.34	0.42
1:A:1273:ASP:OD2	1:A:1275:VAL:HG13	2.20	0.42
1:A:1752:LEU:HD23	1:A:1752:LEU:HA	1.89	0.42
1:A:1879:GLU:OE2	1:A:1902:THR:OG1	2.35	0.42
1:A:1168:CYS:SG	1:A:1203:ILE:HB	2.59	0.42
1:A:1826:ILE:HG22	1:A:1832:MET:HA	2.01	0.42
1:A:1648:LEU:HB2	1:A:1656:MET:SD	2.59	0.42
1:A:2040:PHE:HB3	1:A:2052:GLY:O	2.19	0.42
1:A:2094:ASN:OD1	1:A:2094:ASN:N	2.52	0.42
1:A:2328:ASP:HA	1:A:2332:LYS:O	2.20	0.42
2:K:167:THR:HG23	2:K:170:GLU:HG2	2.01	0.42
1:A:121:VAL:HG11	1:A:362:LEU:O	2.20	0.42
1:A:925:HIS:O	1:A:929:GLU:HG2	2.19	0.42
1:A:1032:VAL:C	1:A:1034:ALA:N	2.76	0.42
1:A:1567:LEU:HD23	1:A:1683:TYR:HD2	1.85	0.42
1:A:1645:LYS:O	1:A:1658:VAL:HA	2.20	0.42
1:A:1946:ALA:HB3	1:A:1950:GLN:NE2	2.35	0.42
1:A:1973:ILE:HD11	1:A:1978:PHE:HB2	2.02	0.42
1:A:2102:ILE:HD13	1:A:2102:ILE:HA	1.67	0.42
1:A:781:PHE:HE2	1:A:783:PRO:HA	1.85	0.42
1:A:849:THR:O	1:A:849:THR:OG1	2.36	0.42
1:A:1317:PHE:CD1	1:A:1345:TRP:HZ3	2.38	0.42
1:A:1520:ILE:CG2	1:A:1526:ILE:CG2	2.97	0.42
1:A:1579:SER:OG	1:A:1580:ASP:N	2.53	0.42
1:A:1625:ILE:HG13	1:A:1633:GLN:HB3	2.01	0.42
1:A:2092:ASP:OD2	1:A:2099:SER:N	2.38	0.42
1:A:2125:ILE:HG22	1:A:2126:ASN:H	1.85	0.42
1:A:301:ILE:HG21	1:A:347:PHE:HE1	1.83	0.42
1:A:1233:TRP:CD1	1:A:1233:TRP:N	2.88	0.42

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1459:LYS:O	1:A:1460:ASN:ND2	2.52	0.42
1:A:2276:TYR:CE1	1:A:2300:PRO:HD2	2.55	0.42
1:A:15:VAL:HG12	1:A:16:ARG:O	2.20	0.41
1:A:251:VAL:HG23	1:A:251:VAL:O	2.20	0.41
1:A:809:SER:O	1:A:814:ILE:HD13	2.20	0.41
1:A:1139:LEU:HD22	1:A:1139:LEU:HA	1.88	0.41
1:A:1170:ILE:HB	1:A:1203:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:1256:ARG:NH2	1:A:1264:TYR:HE1	2.17	0.41
1:A:1589:MET:N	1:A:1589:MET:HE2	2.35	0.41
1:A:1705:ILE:HG12	1:A:1733:ASN:O	2.20	0.41
1:A:1776:THR:OG1	1:A:1777:ILE:N	2.53	0.41
1:A:1826:ILE:HG22	1:A:1831:MET:C	2.45	0.41
1:A:1946:ALA:HB3	1:A:1950:GLN:CD	2.45	0.41
1:A:18:ARG:NH1	1:A:1668:GLY:O	2.53	0.41
1:A:292:GLY:O	1:A:361:PHE:HD1	2.03	0.41
1:A:867:SER:OG	1:A:982:LEU:HD12	2.20	0.41
1:A:1430:ILE:HG12	1:A:1463:TYR:CB	2.50	0.41
1:A:1810:LEU:HA	1:A:1812:TYR:CE2	2.55	0.41
1:A:1837:VAL:CG1	1:A:1839:ILE:HG13	2.49	0.41
1:A:2005:VAL:HG22	1:A:2006:MET:H	1.85	0.41
1:A:406:ASN:HB2	1:A:488:MET:HE2	2.03	0.41
1:A:1016:LEU:HD23	1:A:1017:ASP:N	2.35	0.41
1:A:1494:LEU:HD12	1:A:1496:ILE:HD11	2.02	0.41
1:A:2057:TYR:O	1:A:2074:PHE:HD1	2.02	0.41
1:A:5:ASN:O	1:A:8:GLN:N	2.44	0.41
1:A:89:SER:OG	1:A:90:ASN:N	2.53	0.41
1:A:712:TYR:CD1	1:A:712:TYR:C	2.98	0.41
1:A:1223:LEU:HB3	1:A:1224:PRO:HD2	2.03	0.41
1:A:1597:LYS:HB2	1:A:1597:LYS:HE3	1.58	0.41
1:A:101:ILE:HD12	1:A:284:TYR:HE1	1.85	0.41
1:A:325:LYS:HG2	1:A:351:LEU:HD22	2.03	0.41
1:A:1104:ILE:HG13	1:A:1105:PRO:CD	2.44	0.41
1:A:1143:LYS:HA	1:A:1143:LYS:HD3	1.72	0.41
1:A:1918:ASN:HD22	1:A:1924:ILE:HD13	1.86	0.41
1:A:2304:LYS:HE3	1:A:2320:SER:OG	2.20	0.41
1:A:991:TYR:CB	1:A:1015:ALA:HB1	2.51	0.41
1:A:1059:GLN:HG3	1:A:1060:GLU:H	1.86	0.41
1:A:1288:ILE:HG22	1:A:1290:ILE:CD1	2.50	0.41
1:A:1492:VAL:HG23	1:A:1512:ASN:HA	2.03	0.41
1:A:1531:TYR:C	1:A:1531:TYR:HD1	2.28	0.41
1:A:1558:LEU:HG	1:A:1562:GLY:O	2.20	0.41

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:1663:ASN:CA	1:A:1671:SER:HB2	2.45	0.41
1:A:1971:ASN:O	1:A:1978:PHE:N	2.36	0.41
1:A:2105:ILE:HG22	1:A:2106:ASN:N	2.35	0.41
1:A:2148:ASN:HB3	1:A:2185:GLN:HG3	2.03	0.41
1:A:2227:PRO:HD3	1:A:2232:ALA:HA	2.02	0.41
2:K:124:PHE:HD1	2:K:124:PHE:N	2.19	0.41
1:A:5:ASN:OD1	1:A:5:ASN:N	2.52	0.41
1:A:95:GLU:HB3	1:A:97:ASN:ND2	2.36	0.41
1:A:1307:GLU:HA	1:A:1310:ARG:HD3	2.01	0.41
1:A:1549:ASN:HD22	1:A:1597:LYS:HZ2	1.67	0.41
1:A:1563:VAL:HA	1:A:1566:ILE:HG22	2.02	0.41
1:A:1586:LEU:HB3	1:A:1591:ILE:CG2	2.50	0.41
1:A:1845:TYR:HB2	1:A:1867:PHE:CZ	2.56	0.41
1:A:1874:ALA:O	1:A:1875:ALA:C	2.64	0.41
1:A:2049:ASN:HA	1:A:2053:GLU:OE1	2.19	0.41
2:K:149:GLN:HG2	2:K:150:CYS:N	2.34	0.41
1:A:441:ASN:OD1	1:A:443:GLU:N	2.44	0.41
1:A:517:LYS:HE3	1:A:517:LYS:HB2	1.73	0.41
1:A:792:SER:HB2	1:A:841:ARG:C	2.46	0.41
1:A:1321:GLY:CA	1:A:1341:GLU:HB3	2.51	0.41
1:A:1981:ASN:HB3	1:A:1983:ASP:OD1	2.20	0.41
1:A:2308:HIS:O	1:A:2311:THR:OG1	2.34	0.41
1:A:226:GLU:O	1:A:229:LEU:N	2.47	0.41
1:A:293:ILE:O	1:A:294:HIS:C	2.63	0.41
1:A:875:GLN:OE1	1:A:876:GLN:HG2	2.21	0.41
1:A:1343:ASP:HB2	1:A:1345:TRP:NE1	2.33	0.41
1:A:1817:ILE:HG12	1:A:1824:PHE:O	2.21	0.41
1:A:1907:LYS:HE2	1:A:1907:LYS:HB3	1.88	0.41
1:A:1928:GLY:H	1:A:1939:PHE:HB2	1.86	0.41
2:K:146[A]:GLN:HE21	2:K:146[A]:GLN:HB3	1.70	0.41
1:A:1198:GLU:HA	1:A:1199:PRO:HD3	1.64	0.41
1:A:1462:PRO:HB3	1:A:1475:PHE:CE1	2.56	0.41
1:A:1604:LYS:HB2	1:A:1604:LYS:HE3	1.71	0.41
1:A:788:ILE:H	1:A:788:ILE:HG12	1.61	0.40
1:A:1170:ILE:HD13	1:A:1263:PHE:CZ	2.56	0.40
1:A:1464:SER:HB2	1:A:1473:ASN:OD1	2.21	0.40
1:A:1484:LEU:HD23	1:A:1528:LEU:HD21	2.03	0.40
1:A:1739:ILE:O	1:A:1739:ILE:HG12	2.21	0.40
1:A:1938:TYR:CG	1:A:1939:PHE:N	2.89	0.40
1:A:18:ARG:NH2	1:A:66:SER:HB3	2.36	0.40
1:A:257:GLN:HE21	1:A:257:GLN:HB2	1.71	0.40

Continued on next page...

Continued from previous page...

Atom-1	Atom-2	Interatomic distance (Å)	Clash overlap (Å)
1:A:383:ILE:HD13	1:A:383:ILE:HG21	1.78	0.40
1:A:682:LEU:HD23	1:A:682:LEU:HA	1.93	0.40
1:A:710:GLU:HA	1:A:715:LYS:HE3	2.01	0.40
1:A:1096:PRO:HB2	1:A:1100:ILE:CD1	2.51	0.40
1:A:1134:GLU:HB3	1:A:1138:THR:HG22	2.03	0.40
1:A:1509:TYR:CD2	1:A:1509:TYR:N	2.89	0.40
1:A:1678:SER:HA	1:A:1706:THR:HG23	2.03	0.40
1:A:226:GLU:C	1:A:228:SER:N	2.79	0.40
1:A:890:ILE:HG22	1:A:890:ILE:O	2.21	0.40
1:A:1016:LEU:HG	1:A:1016:LEU:O	2.21	0.40
1:A:1492:VAL:HA	1:A:1512:ASN:HA	2.03	0.40
1:A:1624:PHE:CD2	1:A:1624:PHE:N	2.89	0.40
1:A:1949:TRP:HA	1:A:1957:TYR:O	2.22	0.40
1:A:1980:PHE:HB3	1:A:1984:GLY:HA2	2.02	0.40
1:A:2019:TYR:CE1	1:A:2031:PHE:HB2	2.57	0.40
1:A:1098:ALA:HA	1:A:1225:ASN:ND2	2.37	0.40
1:A:1293:ASP:OD1	1:A:1293:ASP:N	2.46	0.40
1:A:1314:SER:O	1:A:1316:SER:N	2.55	0.40
1:A:1683:TYR:CE1	1:A:1711:ALA:HB1	2.56	0.40
1:A:2016:LYS:HE2	1:A:2053:GLU:CG	2.52	0.40
1:A:68:ARG:O	1:A:72:LEU:HG	2.22	0.40
1:A:379:ALA:O	1:A:381:GLY:N	2.51	0.40
1:A:444:ASN:O	1:A:448:ILE:HG12	2.22	0.40
1:A:1290:ILE:HG22	1:A:1292:LEU:HD21	2.04	0.40
1:A:1354:ARG:O	1:A:1356:VAL:HG23	2.21	0.40
1:A:1471:LYS:HE3	1:A:1471:LYS:HB2	1.77	0.40
1:A:1637:ILE:HD13	1:A:1685:ILE:HG21	2.03	0.40

There are no symmetry-related clashes.

5.3 Torsion angles [i](#)

5.3.1 Protein backbone [i](#)

In the following table, the Percentiles column shows the percent Ramachandran outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the backbone conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Favoured	Allowed	Outliers	Percentiles	
1	A	2340/2375 (98%)	1845 (79%)	471 (20%)	24 (1%)	12	45
2	K	58/251 (23%)	47 (81%)	11 (19%)	0	100	100
All	All	2398/2626 (91%)	1892 (79%)	482 (20%)	24 (1%)	15	45

All (24) Ramachandran outliers are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1197	ARG
1	A	1524	ASP
1	A	1670	ILE
1	A	1520	ILE
1	A	1640	ASN
1	A	1810	LEU
1	A	1531	TYR
1	A	1549	ASN
1	A	1652	ASN
1	A	1671	SER
1	A	2099	SER
1	A	940	THR
1	A	1143	LYS
1	A	1672	SER
1	A	1872	GLY
1	A	1009	VAL
1	A	1534	LYS
1	A	2102	ILE
1	A	1521	THR
1	A	941	VAL
1	A	1046	ILE
1	A	579	VAL
1	A	1012	VAL
1	A	1037	ILE

5.3.2 Protein sidechains ⓘ

In the following table, the Percentiles column shows the percent sidechain outliers of the chain as a percentile score with respect to all PDB entries followed by that with respect to all EM entries.

The Analysed column shows the number of residues for which the sidechain conformation was analysed, and the total number of residues.

Mol	Chain	Analysed	Rotameric	Outliers	Percentiles	
1	A	2054/2140 (96%)	1710 (83%)	344 (17%)	2	11
2	K	54/222 (24%)	45 (83%)	9 (17%)	2	11
All	All	2108/2362 (89%)	1755 (83%)	353 (17%)	4	11

All (353) residues with a non-rotameric sidechain are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	17	PHE
1	A	20	GLN
1	A	39	GLU
1	A	41	THR
1	A	45	LYS
1	A	56	THR
1	A	58	THR
1	A	60	ILE
1	A	61	ASP
1	A	63	TYR
1	A	66	SER
1	A	70	LYS
1	A	74	LYS
1	A	76	LYS
1	A	81	THR
1	A	83	ILE
1	A	97	ASN
1	A	103	ILE
1	A	122	ASN
1	A	132	ASP
1	A	133	SER
1	A	134	ASN
1	A	147	GLU
1	A	148	SER
1	A	153	THR
1	A	158	ARG
1	A	159	GLU
1	A	160	ASN
1	A	161	LEU
1	A	165	GLU
1	A	166	PHE
1	A	169	THR
1	A	173	ARG
1	A	178	ILE
1	A	179	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	194	LYS
1	A	208	THR
1	A	210	LEU
1	A	220	GLU
1	A	242	ASN
1	A	248	THR
1	A	253	ASN
1	A	269	SER
1	A	272	LEU
1	A	273	ARG
1	A	274	VAL
1	A	277	LEU
1	A	280	ILE
1	A	286	ASP
1	A	288	ASP
1	A	289	MET
1	A	294	HIS
1	A	318	LEU
1	A	319	GLU
1	A	323	LYS
1	A	328	ILE
1	A	335	HIS
1	A	340	ASP
1	A	343	VAL
1	A	348	GLU
1	A	353	SER
1	A	367	ILE
1	A	383	ILE
1	A	396	CYS
1	A	400	LEU
1	A	401	ILE
1	A	403	GLN
1	A	404	ILE
1	A	411	LEU
1	A	414	THR
1	A	424	ASP
1	A	464	ASN
1	A	466	THR
1	A	469	LEU
1	A	470	SER
1	A	474	ILE
1	A	490	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	492	THR
1	A	497	SER
1	A	513	THR
1	A	517	LYS
1	A	520	LEU
1	A	521	TRP
1	A	522	GLN
1	A	554	GLN
1	A	556	THR
1	A	558	THR
1	A	567	ILE
1	A	579	VAL
1	A	585	LEU
1	A	591	SER
1	A	615	ASP
1	A	618	VAL
1	A	621	TYR
1	A	634	LYS
1	A	641	ILE
1	A	650	THR
1	A	661	THR
1	A	672	LEU
1	A	680	ILE
1	A	692	ILE
1	A	703	SER
1	A	705	SER
1	A	709	GLU
1	A	711	THR
1	A	715	LYS
1	A	721	LYS
1	A	727	LEU
1	A	730	SER
1	A	737	ILE
1	A	738	VAL
1	A	739	SER
1	A	749	SER
1	A	772	ASP
1	A	777	GLU
1	A	782	ASN
1	A	790	VAL
1	A	814	ILE
1	A	818	GLU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	819	LYS
1	A	820	VAL
1	A	821	MET
1	A	824	GLU
1	A	837	VAL
1	A	839	GLU
1	A	840	GLU
1	A	842	ILE
1	A	846	LYS
1	A	852	SER
1	A	853	ILE
1	A	858	ASN
1	A	860	PHE
1	A	862	LEU
1	A	863	ILE
1	A	866	ILE
1	A	870	LEU
1	A	873	LEU
1	A	874	LYS
1	A	880	GLU
1	A	881	GLU
1	A	883	HIS
1	A	889	ASP
1	A	897	PHE
1	A	906	THR
1	A	908	GLU
1	A	926	ILE
1	A	927	THR
1	A	939	ASP
1	A	940	THR
1	A	942	ASN
1	A	948	LYS
1	A	951	LEU
1	A	955	HIS
1	A	958	ASN
1	A	960	LEU
1	A	961	ASN
1	A	964	PHE
1	A	968	SER
1	A	970	ILE
1	A	979	LEU
1	A	982	LEU

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	983	SER
1	A	984	VAL
1	A	997	THR
1	A	1000	ASN
1	A	1009	VAL
1	A	1011	LEU
1	A	1014	THR
1	A	1016	LEU
1	A	1017	ASP
1	A	1018	GLU
1	A	1025	THR
1	A	1026	LEU
1	A	1030	LEU
1	A	1052	THR
1	A	1054	ASP
1	A	1092	ILE
1	A	1093	LEU
1	A	1094	LEU
1	A	1095	VAL
1	A	1097	LEU
1	A	1109	ASN
1	A	1138	THR
1	A	1139	LEU
1	A	1142	ASP
1	A	1143	LYS
1	A	1152	VAL
1	A	1194	THR
1	A	1196	TYR
1	A	1198	GLU
1	A	1216	LEU
1	A	1221	MET
1	A	1245	GLU
1	A	1251	LEU
1	A	1252	LEU
1	A	1265	TRP
1	A	1275	VAL
1	A	1276	ILE
1	A	1277	THR
1	A	1311	GLU
1	A	1323	THR
1	A	1339	LEU
1	A	1344	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1349	VAL
1	A	1352	VAL
1	A	1353	VAL
1	A	1361	ASP
1	A	1367	ASP
1	A	1369	ILE
1	A	1377	SER
1	A	1409	ILE
1	A	1410	LEU
1	A	1411	GLU
1	A	1419	VAL
1	A	1426	TYR
1	A	1430	ILE
1	A	1444	VAL
1	A	1448	ILE
1	A	1457	LEU
1	A	1458	GLN
1	A	1460	ASN
1	A	1463	TYR
1	A	1469	GLU
1	A	1473	ASN
1	A	1480	THR
1	A	1498	VAL
1	A	1500	MET
1	A	1507	PHE
1	A	1509	TYR
1	A	1513	ASP
1	A	1516	ASP
1	A	1520	ILE
1	A	1521	THR
1	A	1522	LYS
1	A	1526	ILE
1	A	1532	TYR
1	A	1534	LYS
1	A	1535	ASP
1	A	1537	ILE
1	A	1541	LEU
1	A	1543	PHE
1	A	1545	ILE
1	A	1546	GLN
1	A	1549	ASN
1	A	1550	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1553	LEU
1	A	1558	LEU
1	A	1560	GLU
1	A	1563	VAL
1	A	1566	ILE
1	A	1568	LYS
1	A	1576	THR
1	A	1580	ASP
1	A	1584	SER
1	A	1594	ILE
1	A	1596	ILE
1	A	1598	SER
1	A	1605	LEU
1	A	1606	ILE
1	A	1607	LEU
1	A	1613	ILE
1	A	1616	THR
1	A	1617	THR
1	A	1637	ILE
1	A	1638	LYS
1	A	1639	PHE
1	A	1640	ASN
1	A	1642	LEU
1	A	1643	GLU
1	A	1652	ASN
1	A	1657	ILE
1	A	1662	TYR
1	A	1664	LEU
1	A	1665	ASP
1	A	1672	SER
1	A	1674	VAL
1	A	1678	SER
1	A	1687	SER
1	A	1689	VAL
1	A	1691	LYS
1	A	1692	VAL
1	A	1693	ILE
1	A	1703	ILE
1	A	1705	ILE
1	A	1706	THR
1	A	1712	ASN
1	A	1726	ILE

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	1738	SER
1	A	1739	ILE
1	A	1742	VAL
1	A	1745	ASN
1	A	1771	VAL
1	A	1773	LYS
1	A	1780	LYS
1	A	1781	ILE
1	A	1794	ASN
1	A	1798	SER
1	A	1807	GLU
1	A	1809	LEU
1	A	1812	TYR
1	A	1814	LEU
1	A	1817	ILE
1	A	1826	ILE
1	A	1831	MET
1	A	1834	SER
1	A	1836	LEU
1	A	1837	VAL
1	A	1843	LEU
1	A	1852	ASN
1	A	1854	ILE
1	A	1871	ASN
1	A	1876	SER
1	A	1890	SER
1	A	1927	THR
1	A	1959	PHE
1	A	1960	SER
1	A	1975	ASP
1	A	2078	VAL
1	A	2087	SER
1	A	2094	ASN
1	A	2100	ILE
1	A	2102	ILE
1	A	2104	ILE
1	A	2130	PHE
1	A	2143	GLN
1	A	2153	SER
1	A	2154	GLU
1	A	2157	LEU
1	A	2165	THR

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	2181	ASN
1	A	2195	VAL
1	A	2205	SER
1	A	2213	ILE
1	A	2214	TYR
1	A	2221	ASP
1	A	2231	LYS
1	A	2247	ASP
1	A	2254	THR
1	A	2259	PHE
1	A	2263	HIS
1	A	2291	ILE
1	A	2329	LEU
1	A	2337	THR
1	A	2363	LEU
2	K	121	LYS
2	K	124	PHE
2	K	127	LEU
2	K	133	ILE
2	K	142	PHE
2	K	146[A]	GLN
2	K	146[B]	GLN
2	K	167	THR
2	K	176	GLU

Sometimes sidechains can be flipped to improve hydrogen bonding and reduce clashes. All (49) such sidechains are listed below:

Mol	Chain	Res	Type
1	A	36	ASN
1	A	53	ASN
1	A	90	ASN
1	A	97	ASN
1	A	106	GLN
1	A	128	ASN
1	A	134	ASN
1	A	139	ASN
1	A	162	ASN
1	A	222	ASN
1	A	257	GLN
1	A	344	GLN
1	A	386	GLN
1	A	412	ASN

Continued on next page...

Continued from previous page...

Mol	Chain	Res	Type
1	A	426	ASN
1	A	518	ASN
1	A	531	GLN
1	A	538	ASN
1	A	554	GLN
1	A	741	ASN
1	A	758	HIS
1	A	782	ASN
1	A	803	GLN
1	A	925	HIS
1	A	958	ASN
1	A	961	ASN
1	A	993	GLN
1	A	1381	ASN
1	A	1446	GLN
1	A	1473	ASN
1	A	1502	ASN
1	A	1549	ASN
1	A	1621	GLN
1	A	1676	ASN
1	A	1704	ASN
1	A	1709	HIS
1	A	1712	ASN
1	A	1733	ASN
1	A	1821	ASN
1	A	1828	ASN
1	A	1852	ASN
1	A	1868	ASN
1	A	1886	ASN
1	A	1935	ASN
1	A	2148	ASN
1	A	2176	ASN
1	A	2298	ASN
1	A	2310	ASN
2	K	164	ASN

5.3.3 RNA ⓘ

There are no RNA molecules in this entry.

5.4 Non-standard residues in protein, DNA, RNA chains [i](#)

There are no non-standard protein/DNA/RNA residues in this entry.

5.5 Carbohydrates [i](#)

There are no oligosaccharides in this entry.

5.6 Ligand geometry [i](#)

There are no ligands in this entry.

5.7 Other polymers [i](#)

There are no such residues in this entry.

5.8 Polymer linkage issues [i](#)

There are no chain breaks in this entry.

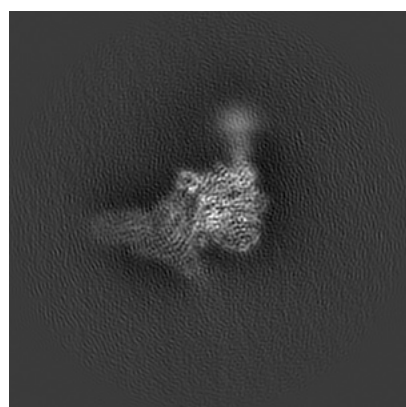
6 Map visualisation [i](#)

This section contains visualisations of the EMDB entry EMD-31628. These allow visual inspection of the internal detail of the map and identification of artifacts.

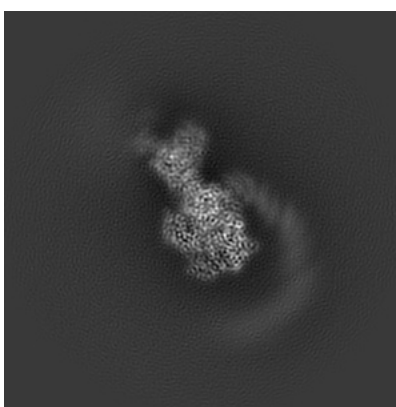
No raw map or half-maps were deposited for this entry and therefore no images, graphs, etc. pertaining to the raw map can be shown.

6.1 Orthogonal projections [i](#)

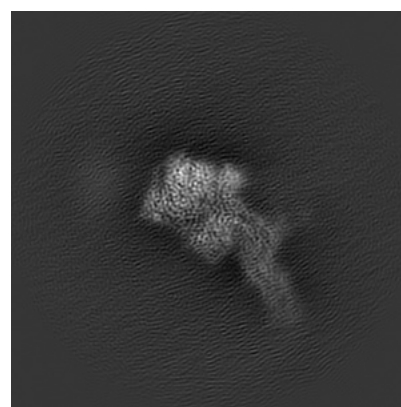
6.1.1 Primary map



X



Y

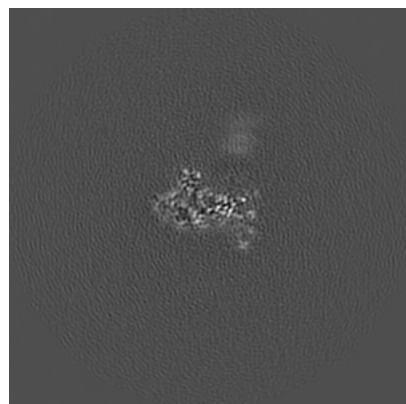


Z

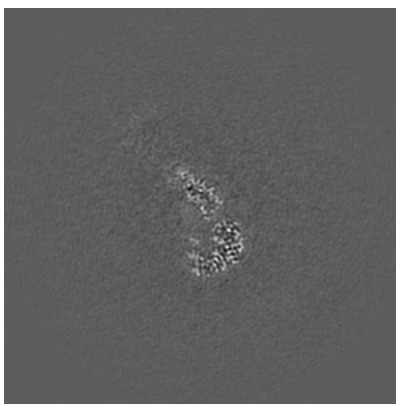
The images above show the map projected in three orthogonal directions.

6.2 Central slices [i](#)

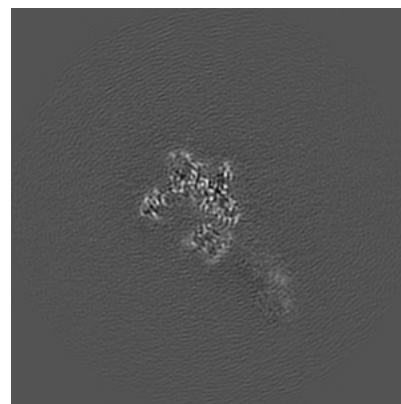
6.2.1 Primary map



X Index: 160



Y Index: 160

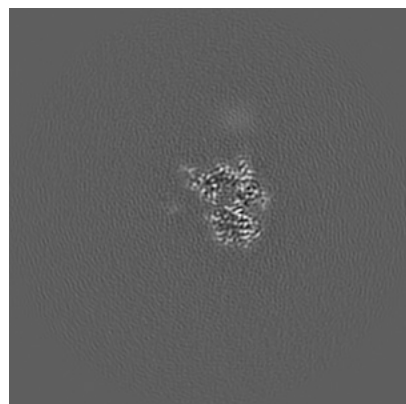


Z Index: 160

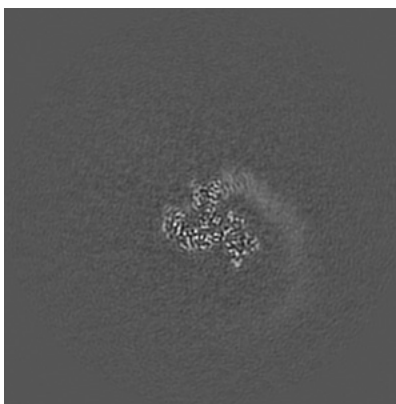
The images above show central slices of the map in three orthogonal directions.

6.3 Largest variance slices [i](#)

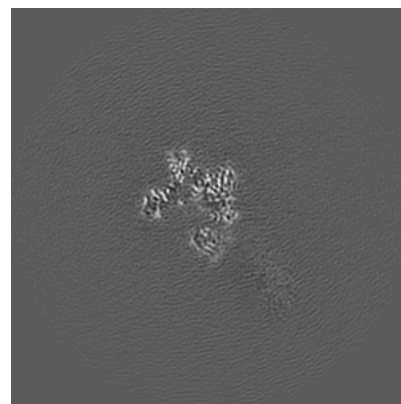
6.3.1 Primary map



X Index: 136



Y Index: 184

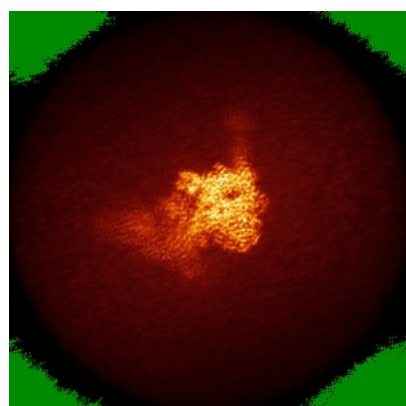


Z Index: 164

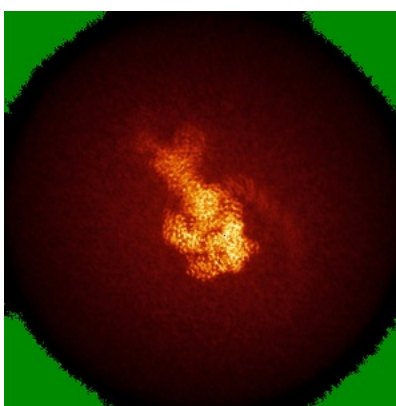
The images above show the largest variance slices of the map in three orthogonal directions.

6.4 Orthogonal standard-deviation projections (False-color) [i](#)

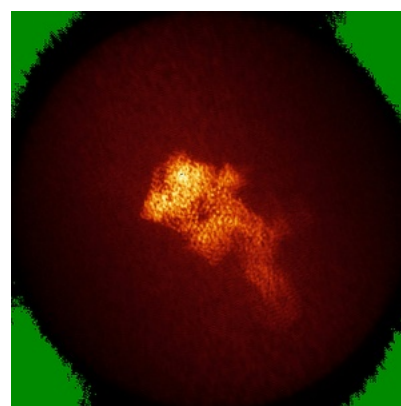
6.4.1 Primary map



X



Y

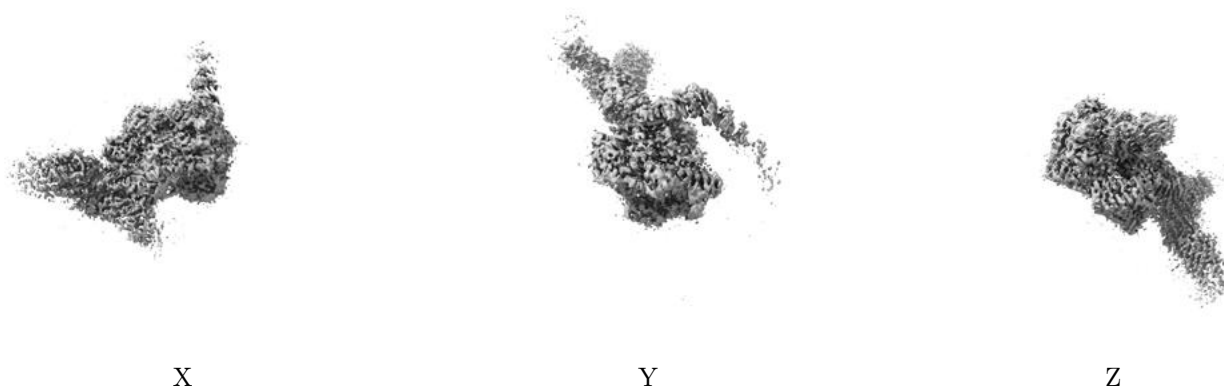


Z

The images above show the map standard deviation projections with false color in three orthogonal directions. Minimum values are shown in green, max in blue, and dark to light orange shades represent small to large values respectively.

6.5 Orthogonal surface views [i](#)

6.5.1 Primary map



The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.02. These images, in conjunction with the slice images, may facilitate assessment of whether an appropriate contour level has been provided.

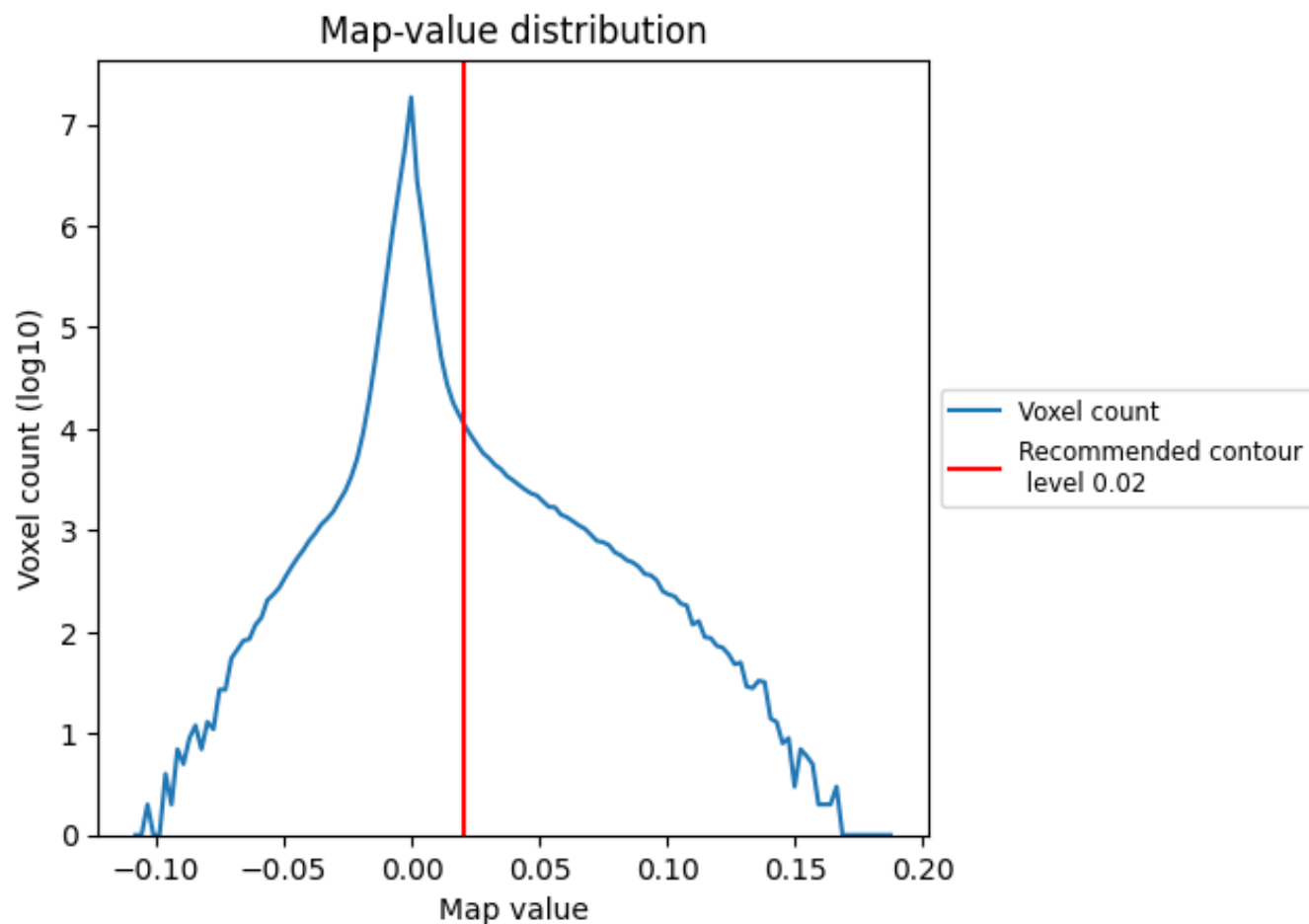
6.6 Mask visualisation [i](#)

This section was not generated. No masks/segmentation were deposited.

7 Map analysis [i](#)

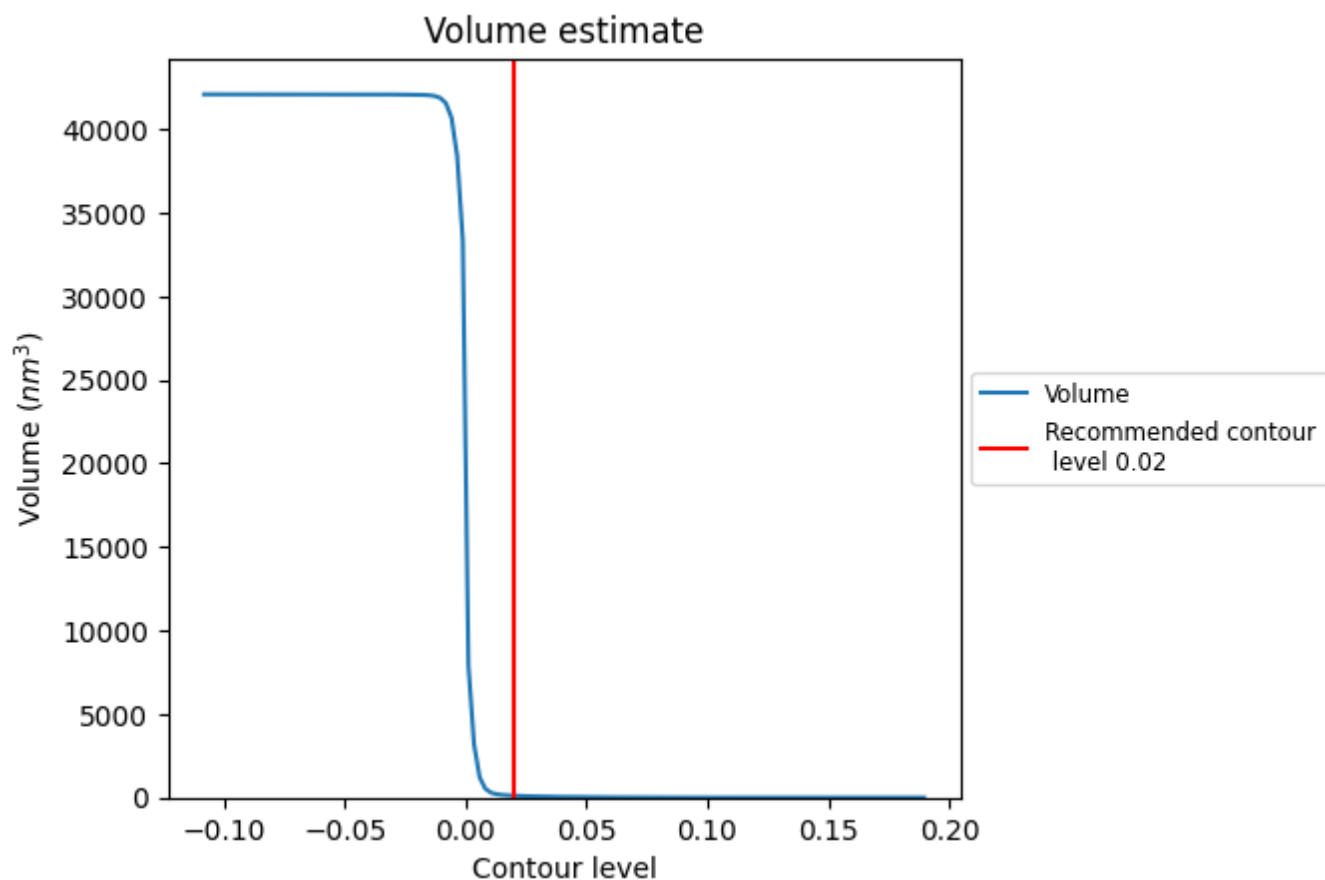
This section contains the results of statistical analysis of the map.

7.1 Map-value distribution [i](#)



The map-value distribution is plotted in 128 intervals along the x-axis. The y-axis is logarithmic. A spike in this graph at zero usually indicates that the volume has been masked.

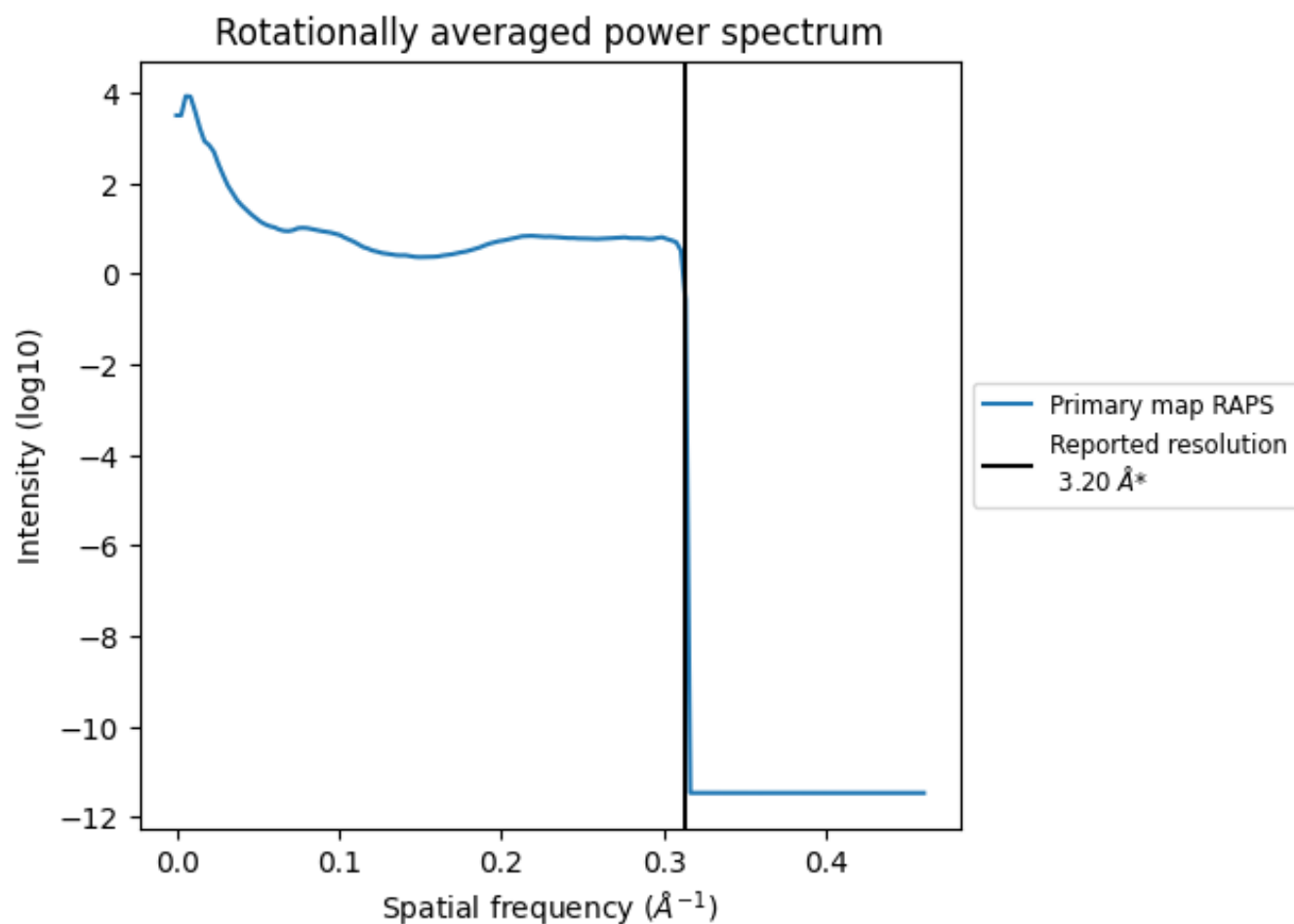
7.2 Volume estimate [i](#)



The volume at the recommended contour level is 111 nm³; this corresponds to an approximate mass of 101 kDa.

The volume estimate graph shows how the enclosed volume varies with the contour level. The recommended contour level is shown as a vertical line and the intersection between the line and the curve gives the volume of the enclosed surface at the given level.

7.3 Rotationally averaged power spectrum ⓘ



*Reported resolution corresponds to spatial frequency of 0.312 $\text{\AA}^{-1}$

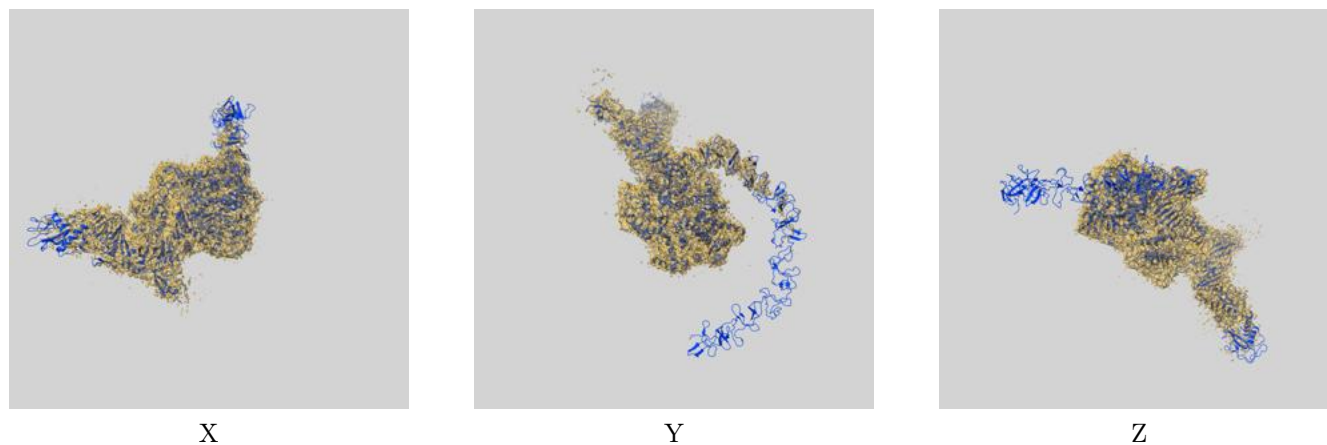
8 Fourier-Shell correlation

This section was not generated. No FSC curve or half-maps provided.

9 Map-model fit [i](#)

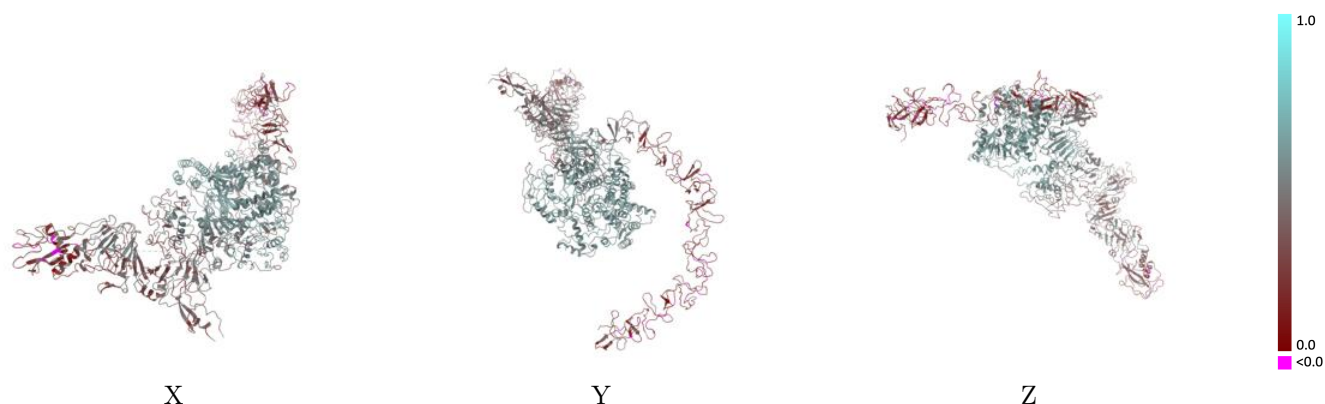
This section contains information regarding the fit between EMDB map EMD-31628 and PDB model 7V1N. Per-residue inclusion information can be found in [section 3](#) on [page 4](#).

9.1 Map-model overlay [i](#)



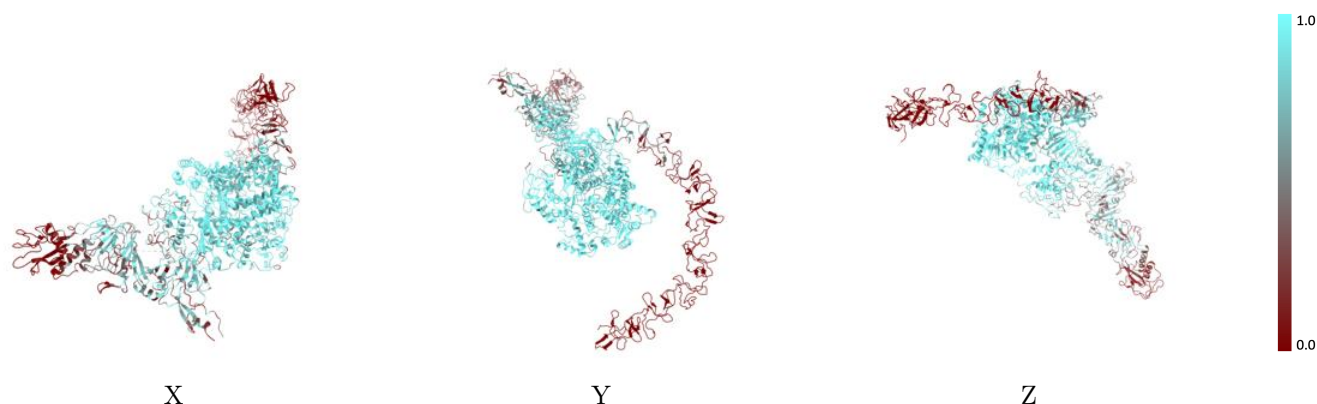
The images above show the 3D surface view of the map at the recommended contour level 0.02 at 50% transparency in yellow overlaid with a ribbon representation of the model coloured in blue. These images allow for the visual assessment of the quality of fit between the atomic model and the map.

9.2 Q-score mapped to coordinate model [i](#)



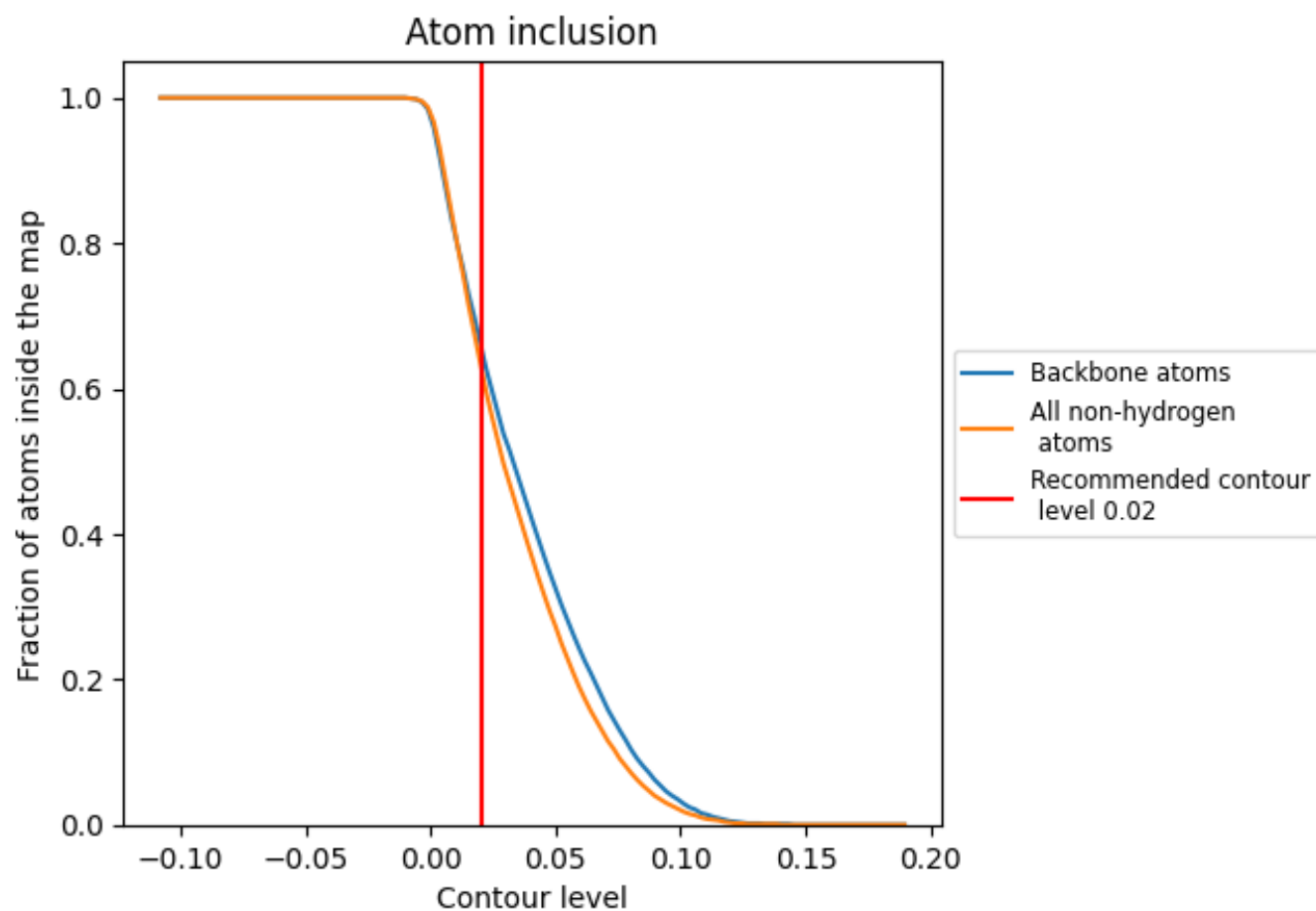
The images above show the model with each residue coloured according to its Q-score. This shows their resolvability in the map with higher Q-score values reflecting better resolvability. Please note: Q-score is calculating the resolvability of atoms, and thus high values are only expected at resolutions at which atoms can be resolved. Low Q-score values may therefore be expected for many entries.

9.3 Atom inclusion mapped to coordinate model [i](#)



The images above show the model with each residue coloured according to its atom inclusion. This shows to what extent they are inside the map at the recommended contour level (0.02).

9.4 Atom inclusion [i](#)



At the recommended contour level, 66% of all backbone atoms, 63% of all non-hydrogen atoms, are inside the map.

9.5 Map-model fit summary ⓘ

The table lists the average atom inclusion at the recommended contour level (0.02) and Q-score for the entire model and for each chain.

Chain	Atom inclusion	Q-score
All	0.6310	0.4410
A	0.6360	0.4430
K	0.4320	0.3700

